



**Universidade Federal de Campina Grande**  
**Centro de Ciências e Tecnologia**  
**Unidade Acadêmica de Eng. Química**  
**Programa de Pós-Graduação em Eng. Química**



**PROJETO DE ESTRUTURA DE CONTROLE APLICADO A  
SISTEMA DE TRATAMENTO DE EFLUENTES**

Simone Cristiane Gallani Rodrigues

Campina Grande - Paraíba  
Setembro/2013

SIMONE CRISTIANE GALLANI RODRIGUES

**PROJETO DE ESTRUTURA DE CONTROLE APLICADO A  
SISTEMA DE TRATAMENTO DE EFLUENTES**

**Tese apresentada ao curso de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande, como parte dos requisitos exigidos para obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.**

**Orientadores:** Prof. Dr. Antonio Carlos Brandão de Araújo  
Prof. Dr. José Jaílson Nicácio Alves

Campina Grande - Paraíba  
Setembro/2013



R696p Rodrigues, Simone Cristiane Gallani.  
Projeto de estrutura de controle aplicado a sistema de tratamento de efluentes / Simone Cristiane Gallani Rodrigues. - Campina Grande, 2013.  
140 f.

Tese (Doutorado em Engenharia Química) - Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2013.

Referências.  
"Orientação : Prof. Dr. Antônio Carlos Brandão de Araújo, Prof. Dr. José Jailson Nicácio Alves".

1. Destilação Extrativa. 2. Lodos Ativados. 3. BSM1. 4. Tese - Engenharia Química. I. Araújo, Antônio Carlos Brandão de. II. Alves, José Jailson Nicácio. III. Universidade Federal de Campina Grande - Campina Grande (PB). IV. Título

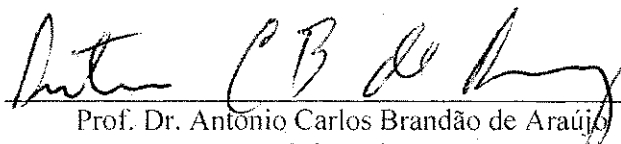
CDU 628.33(043)

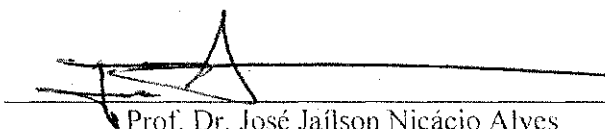
SIMONE CRISTIANE GALLANI RODRIGUES

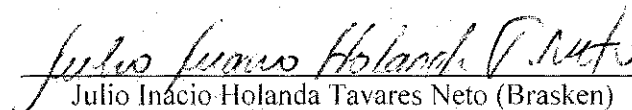
PROJETO DE ESTRUTURA DE CONTROLE APLICADO A SISTEMA DE  
TRATAMENTO DE EFLUENTES

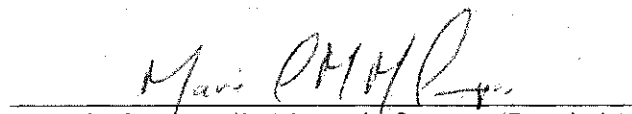
TESE APRESENTADA EM: 13 / 09 / 2013

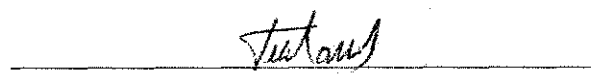
EXAMINADORES:

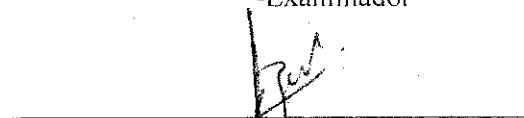
  
Prof. Dr. Antonio Carlos Brandão de Araújo  
-Orientador

  
Prof. Dr. José Jaílson Nicácio Alves  
-Orientador

  
Julio Inácio-Holanda Tavares Neto (Brasken)  
-Examinador Externo

  
Mario Cesar Mello Massa de Campos (Petrobrás)  
-Examinador Externo

  
Prof. Dr. Luis Gonzaga Sales Vasconcelos  
-Examinador

  
Prof. Dr. Romildo Pereira Brito  
-Examinador

Campina Grande - Paraíba

Setembro/2013

*Aos meus pais Vilma e Jusué  
Ao meu esposo Samer  
Aos meus filhos Isabela e Lucas*

## AGRADECIMENTOS

À Deus, por não desistir de mim e ser meu companheiro em todos os momentos de minha vida.

Ao meu esposo pelo incentivo, compreensão e encorajamento, durante todo este período.

Aos meus filhos, que embora não tivessem conhecimento disto, iluminaram de maneira especial os meus pensamentos me levando a buscar de mais conhecimentos.

Ao meu orientador Antônio Carlos Brandão de Araújo, pela disponibilidade, atenção dispensada, paciência, dedicação e profissionalismo... um Muito Obrigado.

As minhas amigas do Larca pela amizade e apoio durante todo o doutorado.

Aos meus colegas de doutorado, pelos momentos de entusiasmo compartilhados em conjunto.

A todos os demais... .

Rodrigues, Simone Cristiane Gallani. **Projeto de Estruturas de Controle Aplicado a Sistema de Tratamento de Efluentes**. Campina Grande: Universidade Federal de Campina Grande. Orientador: Antônio Carlos Brandão de Araújo e José Jailson Nicácio Alves.

## RESUMO

O objetivo do presente trabalho foi formalizar e implementar um procedimento sistemático para a seleção de estruturas de controle em estações de tratamento de águas residuais e mostrar que a aplicação da metodologia proposta está de acordo com os achados "empíricos" em relação ao funcionamento do presente processo. O foco foi a busca de uma estrutura de controle que leva à exploração econômica ideal, rejeitando distúrbios nas camadas mais baixas na hierarquia de controle evitando violação das restrições de regulação mais importantes relativas à descarga de efluentes. Iniciamos a otimização de um modelo não-linear no estado estacionário do processo. As restrições ativas resultantes devem ser escolhidas como variáveis controladas econômicas. No capítulo 3, os resultados confirmaram o que é economicamente viável controlar a concentração de oxigênio nas bacias aeróbias e a de nitrato no segundo tanque anóxico em seus respectivos limites inferiores, enquanto que a amônia no efluente a partir dos bioreactores deve ser controlada no seu limite superior. Além disso, como uma boa prática é operar com a mínima manipulação, a taxa de fluxo de descarte deve ser fixada em seu ponto de referência ideal nominal. O controle descentralizado proposto, que consiste em controladores PI simples, é capaz de manter o processo dentro dos limites de regulação a um pequeno custo quando perturbações dinâmicas representada por três arquivos de tempo afeta o processo, pode-se supor que, de acordo com a aplicação da metodologia sistemática, complexos reguladores (multivariável) não são necessárias para o processo de ASM1. No capítulo 4, um novo modelo matemático de decantador secundário no estado estacionário é desenvolvido com base na teoria das equações diferenciais parciais aplicadas à lei de conservação com fluxos descontínuos. A amônia no efluente proveniente da seção de reação e o total de sólidos suspensos no efluente final em seus limites superiores, além da taxa de reciclo interno no seu limite inferior devem ser escolhidos como as variáveis controladas econômicas. Para os graus de liberdades restantes usaram-se vários métodos de sensibilidade local (linear) para encontrar um conjunto de variáveis controladas irrestritas, que minimizam a perda entre a operação real e ideal; particularmente escolhemos para controlar combinações lineares de medições prontamente disponíveis, de modo a minimizar o efeito das perturbações e erros de medição sobre o desempenho ótimo da planta.

**Palavras-Chave:** Estrutura de Controle, Lodos Ativados, BSM1.

Rodrigues, Simone Cristiane Gallani. **Project Control Structures Applied to Wastewater Treatment System.** Campina Grande: Federal University of Campina Grande. Supervisor: Antônio Carlos Brandão de Araújo and e José Jailson Nicácio Alves.

### ABSTRACT

The objective of this work was to formalize and implement a systematic and yet simple procedure for the selection of control structures in wastewater treatment plants (WWTPs) and to show that the application of the proposed methodology agrees with the “empirical” findings regarding the operation of this process. The focus is to search for a control structure that leads to optimal economic operation, while promptly rejecting disturbances at lower layers in the control hierarchy avoiding thus violation of the more important regulation constraints on effluent discharge. We start by optimizing a steady-state nonlinear model of the process. The resulting active constraints must be chosen as economic controlled variables. In chapter 3, the results confirmed that it is economically optimal to control the oxygen concentration in the aerobic basins and the nitrate in the second anoxic tank at their respective lower bounds, whereas the effluent ammonia from the bioreactors should be controlled at its upper limit. In addition, because it is good practice to operate with minimal manipulation, the wastage flow rate should be fixed at its nominal optimal set point. The proposed decentralized control configuration, consisting of simple PI controllers, is capable of maintaining the process well within the regulatory limits at a small cost when dynamic disturbances represented by three weather files affect the process, therefore suggesting that, according to the applied systematic methodology, more complex (multivariable) regulators are not necessary for the ASM1 process. In chapter 4, a new steady-state secondary settler mathematical model is developed based on the theory of partial differential equations applied to the conservation law with discontinuous fluxes. The effluent ammonia from the bioreaction section and the final effluent total suspended solids at their respective upper limits, in addition to the internal recycle flow rate at its lower bound must be chosen as economic controlled variables. The remaining degrees of freedom need to be fulfilled, and we use several local (linear) sensitivity methods to find a set of unconstrained controlled variables that minimizes the loss between actual and optimal operation; particularly we choose to control linear combinations of readily available measurements so to minimize the effect of disturbances and implementation errors on the optimal static performance of the plant.

**Keywords:** Control structures, Activated Sludge, BSM1



## SUMÁRIO

<b>LISTA DE FIGURAS .....</b>	<b>x</b>
<b>LISTA DE TABELAS.....</b>	<b>xii</b>
<b>LISTA DE SÍMBOLOS.....</b>	<b>xiii</b>
<b>CAPÍTULO 1.....</b>	<b>1</b>
<b>1. Introdução.....</b>	<b>1</b>
1.1 Objetivos .....	3
<b>CAPÍTULO 2.....</b>	<b>4</b>
<b>2. Introdução.....</b>	<b>4</b>
2.1 Processos de Lodos Ativados.....	4
2.1.1 Mecanismos Biológicos.....	5
2.1.2 Remoção de Matéria Carbonácea .....	6
2.1.3 Remoção de Matéria Nitrogenada .....	7
2.1.4 Transferência de Oxigênio em Sistemas de Lodo Ativado .....	10
2.1.4.1 Taxa de Transferência de Oxigênio (N).....	10
2.1.4.2 Teorias de Transferência de Massa .....	11
2.1.4.3 Principais fatores que influenciam na transferência de Oxigênio .....	12
2.1.4.4 Metodologias usadas na determinação do coeficiente volumétrico de transferência de massa, $kLa$ .....	13
2.1.4.5 Função da transferência de Oxigênio em estado não estacionário.....	14
2.1.4.6 Análise Dimensional .....	15
2.2 Modelos.....	16
2.2.1 Modelo BSM1 .....	16
2.2.2 Modelo ASM1 .....	18
2.2.3 Modelo do Sedimentador Secundário.....	21
2.3 Balanços de Massa .....	26
<b>CAPÍTULO 3.....</b>	<b>31</b>
<b>3. Introdução.....</b>	<b>31</b>
3.1 Projeto de Estrutura de Controle do tipo “Plantwide” .....	33
3.1.1 Definição dos objetivos operacionais e restrições.....	37
3.1.2 Determinação das variáveis manipuladas e dos graus de liberdade do sistema .....	39
3.1.3 Seleção das variáveis primárias de controle .....	40
3.1.4 Manipulação da capacidade de produção .....	42
3.1.5 Projeto da camada de controle regulatória .....	43
3.1.7 Projeto da camada de controle supervisória .....	45
3.1.8 Projeto da camada de otimização .....	46

3.1.9 Validação da estrutura de controle proposta.....	47
3.1.10 Sumário do projeto de estruturas otimizadas de operação .....	47
3.2 Aplicação do Controle Plantwide a uma Planta de Tratamento de Efluente.....	47
3.2.1 Análise descendente (“top-down”).....	47
3.2.2 Análise ascendente (“bottom-up”).....	56
3.3 Discussões .....	65
3.4 Conclusão .....	67
<b>CAPÍTULO 4.....</b>	<b>68</b>
<b>4. Introdução.....</b>	<b>68</b>
4.1 Teoria do Fluxo de Sólidos .....	69
4.2 Aplicação do Controle Plantwide a uma Planta de Tratamento de Efluente utilizando um modelo de sedimentador unidimensional baseado na lei da conservação de massa. ....	73
4.2.1 Descrição do processo .....	73
4.2.2 Descrição da Metodologia.....	78
4.2.2.1 <i>Definição do Objetivo operacional e determinação da operação ótima no estado estacionário:</i> .....	79
4.2.2.2 <i>Seleção das variáveis econômicas controladas (“primárias”)</i> .....	79
4.2.3 <i>Análise de Sensibilidade dos resultados</i> .....	82
4.2.3.1 <i>Etapa 1: Objetivos Operacionais</i> .....	82
4.2.3.2 <i>Etapa 2: Operação Ótima em estado estacionário</i> .....	83
4.2.3.3 <i>Etapa 3- Seleção das variáveis</i> .....	85
4.2.3.4 <i>Análise de Sensibilidade do custo em relação ao preço de energia e disposição.</i> 89	
4.3 Discussão.....	91
4.4 Conclusões .....	92
Trabalhos Futuros.....	94
Referências Bibliográficas .....	95
ANEXO I.....	103
ANEXO II .....	105
ANEXO III.....	137

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Principais reações na remoção de carbono orgânico (Olsson e Newell, 1999).....	7
Figura 2: Principais reações na remoção de nitrogênio (Olsson e Newell, 1999).....	7
Figura 3: Esquema geral de um sistema de aeração de ar difuso.....	16
Figura 4: Layout geral da planta BSM1 .....	18
Figura 5: Processo do Sedimentador Secundário.....	21
Figura 6: Representação gráfica da velocidade de sedimentação obtida pelo modelo Takács.....	25
Figura 7: Hierarquia de controle típica de uma planta de processo (Skogestad, 2000).....	34
Figura 8: Vazão do afluente e compostos orgânicos e nutrientes para os diferentes eventos meteorológicos.....	52
Figura 9: RGA no estado estacionário em malha aberta.....	57
Figura 10: RGA para frequência “crossover”.....	58
Figura 11: Número RGA do modelo linearizado do processo com uma função da frequência.....	58
Figura 12: RGA no estado estacionário assumindo o controle de oxigênio perfeitamente ajustado.....	59
Figura 13: RGA na frequência “crossover” assumindo o controle de oxigênio perfeitamente ajustado.....	59
Figura 14: Número RGA com uma função da frequência para o modelo linearizado parcialmente controlado.....	60
Figura 15: Configuração do controle baseado na análise da RGA .....	61
Figura 16: Respostas para malha fechada para o sistema no tempo seco sem ação do controle ‘feedforward’.....	62
Figura 17: Configuração de controle com o controle “feedforward”.....	63
Figura 18: Respostas para malha fechada para o sistema no tempo seco com ação do controle “feedforward”.....	63
Figura 19: Respostas para malha fechada para o sistema no tempo de chuva com ação do controle “feedforward”.....	64
Figura 20: Respostas para malha fechada para o sistema no tempo de tempestade com ação do controle “feedforward”.....	65
Figura 21: Distúrbios em $Q_0$ e $SNH_{in}$ para tempo seco.....	67
Figura 22: Curva de Fluxo de sólidos devido à sedimentação (I), devido à retirada de lodo (II) e fluxo total (III).....	71

Figura 23: Esquema de um sedimentador clarificador-espessante, no qual $X$ representa a concentração, e os três pontos na coordenada $Z$ . .....	73
Figura 24: Gráfico do sedimentador no estado estacionário (Dieh, 2001).....	75
Figura 25: Vazão de efluente e variação de temperatura para o evento de longo prazo (Alex <i>et al.</i> (2008). .....	84
Figura 26: Análise de sensibilidade do custo $J$ em relação ao preço de disposição $K_D$ , considerando $K_E$ no valor nominal.....	90
Figura 27: Análise de sensibilidade do custo em relação ao preço da energia $K_E$ , considerando $K_D$ no valor nominal.....	91

**LISTA DE TABELAS**

Tabela 1: Processos Básicos do ASM1 .....	20
Tabela 2: Procedimento para projeto de estruturas otimizadas.....	35
Tabela 3: Número típico de graus de liberdade para algumas unidade de processo .....	39
Tabela 4: Restrições do Processo .....	49
Tabela 5: Distúrbios do Processo .....	52
Tabela 6: Efeito dos distúrbios em valores ótimos das variáveis selecionadas no sistema.....	54
Tabela 7: Parâmetros de sintonia .....	61
Tabela 8: Todos os estados estacionários do sedimentador (Dieh, 2001).....	74
Tabela 9: Restrições do Processo .....	82
Tabela 10: Distúrbios do Processo .....	84
Tabela 11: Efeito dos distúrbios nos valores ótimos das variáveis selecionadas no sistema..	86
Tabela 12: Calculo da perda não linear para os vários distúrbios.....	89
Tabela 13: Matriz de Petersen para o modelo ASM1 .....	137
Tabela 14: Valores dos parâmetros estequiométricos e cinéticos para os processos biológicos. .....	138
Tabela 15: Tabela de parâmetros de sedimentação .....	140

## LISTA DE SÍMBOLOS

- $\emptyset_{fe}$  – taxa de perda de sólido no efluente
- $\emptyset_{fw}$  – taxa de perda de sólido na disposição do lodo
- $\rho_1$  – crescimento aeróbico dos heterotróficos,
- $\rho_2$  – crescimento anóxico dos heterotróficos,
- $\rho_3$  – crescimento aeróbico dos autotróficos,
- $\rho_4$  – decaimento dos heterotróficos
- $\rho_5$  – decaimento dos autotróficos;
- $\rho_6$  – amonificação do nitrogênio orgânico solúvel;
- $\rho_7$  – hidrólise de compostos orgânicos;
- $\rho_8$  – hidrólise do nitrogênio orgânico.
- $\omega_c$  – frequência “crossover”
- $\epsilon$  - excesso de fluxo
- A – área do sedimentador
- ASMI – Modelo de Lodo Ativado nº1 ( Activated Sludge Model nº1)
- $b_A$  – taxa de decaimento da biomassa autotrófica
- $b_H$  – taxa de decaimento da biomassa heterotrófica
- BSM1 – Benchmark Simulation Model nº1
- $c$  – variável controlada
- $C_D$  – custo da disposição de lodo
- $d$  – distúrbio
- DBO – demanda biológica de oxigênio
- DBO<sub>5</sub> – demanda biológica de oxigênio de 5 dias
- DQO – demanda química de oxigênio
- $E_A$  – custo de aeração
- $eff$  – efluente
- $E_M$  – custo de mistura
- $E_P$  – custo de bombeamento
- ETE – estação de tratamento de esgoto
- $f_P$  – fração de biomassa que resulta em produtos particulados
- $f_{ns}$  – frações não sedimentáveis
- F/M – relação alimento/biomassa
- G – matriz do estado estacionário (modelo linear)

- $h_g$  – fator de correção para  $\mu_H$  sob condições anóxicas  
 $h_h$  – fator de correção para hidrólise sob condições anóxicas  
 $I$  – intensidade da aeração  
 $i_{XB}$  – massa N/massa DQO na biomassa  
 $i_{XP}$  – massa N/massa em DQO de produto de biomassa  
 $J$  – função escalar de custo  
 $J$  – jacobiana do modelo  
 $J_B$  – fluxo de sólido por remoção  
 $J_s$  – fluxo de sólidos devido a gravidade  
 $J_{uu}$  – hessiana  
 $k_a$  – taxa específica de amonificação  
 $K_C$  – preço da disposição de lodo  
 $K_E$  – preço de energia  
 $K_L a$  – coeficiente de transferência de oxigênio  
 $k_h$  – máxima taxa específica de hidrólise  
 $K_{NH}$  – coeficiente de saturação de amônia para organismos autotróficos  
 $K_{NO}$  – coeficiente de saturação de nitrato para heterotróficos  
 $K_{O,A}$  – coeficiente de saturação de oxigênio para organismos autotróficos  
 $K_{O,H}$  – coeficiente de saturação de oxigênio para organismos heterotróficos  
 $K_s$  – coeficiente de saturação para organismos heterotróficos  
 $K_x$  – coeficiente de saturação para substrato lentamente biodegradável  
 $L$  – função perda  
MLSS – sólidos em suspensão no licor misto  
MPC – controle preditivo  
 $N$  – taxa de transferência de oxigênio  
OD – oxigênio dissolvido  
PI – controle proporcional – integral  
 $Q_0$  – fluxo do influente  
 $Q_a$  – fluxo do reciclo interno,  
 $Q_e$  – fluxo do efluente  
 $Q_f$  – fluxo da entrada do sedimentador  
 $Q_k$  – fluxo nos compartimentos dos reatores  
 $Q_r$  – fluxo do reciclo externo,  
 $Q_w$  – fluxo da descarga de lodo

$r_h$  – parâmetro de sedimentação zonal  
 $r_p$  – parâmetro de sedimentação floculante  
RGA – matriz de ganho relativo  
 $R_k$  – taxa de reação de cada compartimento dos reatores  
RTO – otimização em tempo real  
 $S_{ALK}$  – alcalinidade  
 $S_I$  – matéria orgânica solúvel inerte  
 $S_{ND}$  – nitrogênio orgânico solúvel biodegradável  
 $S_{NH}$  – nitrogênio amoniacal  
 $S_{NO}$  – nitrito e nitrato  
 $S_O$  – oxigênio  
 $S_S$  – substrato rapidamente biodegradável  
SISO – simples entrada e simples saída (Single Input Single. Output)  
 $S_I$  – matriz de escalonamento  
 $S_o^*$  - oxigênio saturado  
SRT – idade do lodo  
TN – total de nitrogênio  
TSS – total de sólidos suspensos  
 $TX_{fa}$  – total de biomassa no reator  
 $TX_{fs}$  – total de biomassa no sedimentador  
 $u$  – variáveis manipuladas  
 $V$  – volume  
 $v_0$  – velocidade máxima de sedimentação de Vesilind  
 $v'_0$  – máxima velocidade de sedimentação  
 $X$  – concentração de lodo total de particulados  
 $x$  – variáveis de estado  
 $X_{B,A}$  - biomassa autotrófica  
 $X_{B,H}$  - biomassa heterotrófica  
 $X_I$  - matéria orgânica particulada inerte  
 $X_{ND}$  – nitrogênio orgânico particulado biodegradável  
 $X_P$  – matéria particulada resultante do decaimento da biomassa  
 $X_S$  – substrato lentamente biodegradável  
 $X_M$  – concentração limitante



$y$  – variáveis controladas/medidas

$Y_A$  – rendimento autotrófico

$Y_H$  – rendimento heterotrófico

$Z_a$  – concentração no reciclo interno

$Z_f$  – concentração na entrada do sedimentador

$Z_k$  – concentração nos compartimentos dos reatores

$z_m$  – altura individual de cada camada do sedimentador

$Z_r$  – concentração no reciclo externo

$Z_w$  – concentração na descarga de lodo

$\gamma$  – número condicional

$\mu_A$  – máxima taxa de crescimento específico da biomassa autotrófica

$\mu_H$  – máxima taxa de crescimento específico da biomassa heterotrófica

$\omega$  – frequência

# CAPÍTULO 1

## 1. Introdução

Um dos problemas mais graves que os nossos ecossistemas estão enfrentando hoje em dia e que será sempre uma preocupação constante é a poluição das águas, com conseqüências bem reconhecida não apenas por especialistas dentro da comunidade científica, mas também pela população em geral. Particularmente a cada dia, grandes quantidades de nutrientes e matéria orgânica são descartados em corpos d'água podendo causar sérios problemas como a eutrofização (crescimento excessivo de algas e plantas) e o consumo excessivo de oxigênio, que afetam negativamente, em um primeiro nível, a flora e fauna aquáticas. Com intuito de minimizar esses impactos e otimizar a eficiência do processo de tratamento, surgiram as estações de tratamento de águas residuais, normalmente compostas de sistemas complexos e interdependentes, reunidos em um processo de várias etapas cuja interação e efeitos acumulativos determinam a qualidade do efluente produzido.

Segundo dados do IBGE- Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística, somente 28,5% do total de municípios no Brasil possuem uma estação de tratamento de esgoto (ETE), sendo que o restante do esgoto é simplesmente lançado em rios e córregos ou em fossas sépticas, com elevada probabilidade de contaminação dos lençóis freáticos (IBGE,2008) ou seja um dos maiores problemas ambientais do Brasil hoje é a falta de coleta e tratamento dos esgotos.

O controle dos recursos hídricos e do lançamento de efluentes no Brasil teve início na década de 70, juntamente com a maior parte da legislação voltada à proteção ambiental. Especificamente sobre o tema, em 1986 foi editada a Resolução CONAMA nº 20/1986, que tratava da classificação e enquadramento dos corpos d'água no Brasil. Recentemente, o Conselho Nacional de Meio Ambiente publicou a Resolução nº. 430, em 13 de maio de 2011, que trata das condições, parâmetros, padrões e diretrizes para a gestão do lançamento de efluentes em corpos d'água receptores. A referida Resolução altera as Resoluções anteriores do mesmo órgão, determinando que efluentes de qualquer fonte poluidora somente poderão ser lançados diretamente nos corpos receptores após o devido tratamento e seguindo as novas orientações legais. Entretanto, manteve as disposições anteriores no que diz respeito à classificação e enquadramento de corpos d'água (em doces, salobras e salinas).

Em âmbito jurídico, todo aquele (pessoa física ou jurídica) que descumprir o dever de não conspurcar as águas através do lançamento de efluentes sanitários in natura enquadrar-se-

á na situação jurídica de poluidor (art. 3º, IV, Lei 6.938/81) e estará sujeito às sanções previstas em âmbito administrativo, cível e criminal.

Segundo dados *Organização Mundial da Saúde em 2004* cada R\$ 1 investido em saneamento gera economia de R\$ 4 na área de saúde ou seja além da preocupação para conservação ambiental, o controle dos recursos hídricos e do lançamento de efluentes é importante para garantir o bem estar e a saúde da população.

O tratamento de esgoto municipal geralmente usa uma combinação de tratamentos primários (mecanismos físicos visando remoção de sólidos sedimentáveis), secundário (etapa biológica) e terciário (unidade de tratamento físico-químico). O processo de lodo ativado é o tratamento biológico de maior utilização como sistema de depuração dos esgotos, domésticos e industriais, por apresentar o melhor custo-benefício, ser muito flexível (que pode ser adaptado a qualquer tipo de águas residuais), confiável e tem capacidade de produção de efluente de alta qualidade (Mulas, 2006).

Segundo Metcalf e Eddy (2003), os objetivos globais do tratamento biológico de esgotos domésticos são: (1) transformar (oxidar) componentes dissolvidos e particulados biodegradáveis (matérias carbonáceas) em produtos finais aceitáveis; (2) capturar e incorporar sólidos suspensos e não sedimentáveis em flocos biológicos ou biofilme, (3) transformar ou remover nutrientes, como nitrogênio e fósforo; (4) em alguns casos, remover específicos componentes orgânicos.

Dentro do espírito de eficiência, esses processos devem ser capazes de operar com normas e especificações de descarga cada vez mais rigorosas e, ao mesmo tempo atender as restrições do orçamento operacional. Em outras palavras, há uma busca frenética para a melhor forma de desempenho da planta de operação e otimização de custos. Estes objetivos podem ser alcançados no momento da concepção do projeto, ou seja, na fase de projeto / ou durante a operação das instalações já existentes. Em ambos os casos, o uso de técnicas de controle de processo, ou seja, a seleção adequada da estrutura de controle em um sentido mais amplo em toda a planta, parece ser um ingrediente fundamental na receita usada para proporcionar um funcionamento eficiente e confiável para processos de tal complexibilidade. No entanto, desde o princípio, qualquer estrutura de controle deve ter uma arquitetura muito simples, assim como ser de fácil operação e manutenção, já que investimentos em tais projetos de lodo ativado não são contabilizados para terem um retorno financeiro atrativo de qualquer tipo visando normalmente um ganho ambiental.

## 1.1 Objetivos

O objetivo global deste trabalho é formalizar e implementar um procedimento sistemático proposto por Skogestad (2004) para a seleção de estrutura de controle e com isso contribuir na melhoria do desempenho, principalmente econômico de ETE's, assim como operacional, através da garantia de que o efluente produzido esteja dentro das restrições diversas (operacionais e de regulamentação), demonstrando assim que a maioria das descobertas "empíricas" sobre o funcionamento desse processo pode ser justificado rigorosamente pela aplicação da metodologia proposta.

Os objetivos específicos a que este trabalho se destina é a aplicação de um procedimento sistemático para o projeto de estrutura de controle "plantwide" com ênfase na seleção das variáveis controladas, dividido em duas partes principais:

- Análise descendente ("top-down") que inclui a definição dos objetivos operacionais, a identificação de variáveis manipuladas e graus de liberdade e as variáveis controladas primárias e considerações sobre os graus de liberdade disponíveis para atendê-las.
- Análise ascendente ("bottom-up") do sistema de controle começando com projeto da camada de controle de regulação, usando controladores de baixa complexibilidade, projeto da camada de controle supervísoria, projeto da camada de otimização e por fim a validação da estrutura de controle proposta.

## CAPÍTULO 2

### 2. Introdução

Projetos de supervisão, monitoramento, controle e otimização de plantas de tratamento de lodos ativados, não podem ser desenvolvidos eficientemente sem um modelo que caracterize os fenômenos complexos, próprios do processo de lodos ativados. Segundo Olsson e Newell (1999), não pode ser controlado nem modelado o que não pode ser entendido. Partindo deste postulado é que se torna indispensável à apresentação dos mecanismos biológicos que governam os principais processos de oxidação da matéria orgânica, nitrificação e desnitrificação e de suas interações no modelo de lodos ativados BSM1 (Benchmark Simulation Model n.1), modelo este utilizado como planta em nossos estudos de otimização e controle. Na primeira seção deste capítulo são discutidos as interações dos mecanismos biológicos presentes em uma planta de tratamento de lodos ativados, com a biomassa nos processos de remoção da matéria carbonácea e nitrogenada, incluindo uma explicação dos processos de nitrificação e desnitrificação. A seção seguinte apresenta os modelos BSM1 e ASM1 (Activated Sludge Models nº1) e o modelo de sedimentador secundário.

#### 2.1 Processos de Lodos Ativados

As reações envolvendo a remoção de nutrientes de plantas de tratamento biológico podem ser convenientemente classificadas em remoção de matéria carbonácea, nitrogenada e remoção de fósforo.

O processo de lodos ativados com remoção de matéria nitrogenada requer condições tanto aeróbias quanto anóxicas, onde, em lugar do oxigênio dissolvido, o nitrato é usado como agente oxidante. Uma das configurações de planta mais conhecidas, para a remoção de matéria nitrogenada, é o *sistema com pré-desnitrificação*. Para satisfazer a demanda de matéria orgânica biodegradável no processo de desnitrificação, é adicionado um reator biológico desnitrificante, que utiliza a matéria orgânica do afluente. Para garantir a presença de nitrato neste reator, o lodo proveniente do reator biológico nitrificante é reciclado através do sistema de reciclo interno. O reator desnitrificante é mantido anóxico, enquanto no reator nitrificante é adicionado ar. Nesta configuração, as principais variáveis manipuladas são a aeração, o reciclo interno, o lodo em excesso e a recirculação de lodo.

### 2.1.1 Mecanismos Biológicos

Em plantas de lodos ativados, diversos mecanismos interagem, sendo que alguns deles ocorrem de forma simultânea e outros de forma seqüencial. Inicialmente estes mecanismos começam a atuar já no próprio sistema de coleta e interceptação de esgotos, mas o máximo de atividade se desenvolve na planta de tratamento. Entre os diversos organismos envolvidos nesses mecanismos, como fungo, algas e protozoários, as bactérias são as mais importantes na estabilização da matéria orgânica, porém, ao longo do presente trabalho, o termo bactéria denotará genericamente os microrganismos presentes no processo de lodos ativados, representando assim a biomassa (Metcalf e Eddy, 2003).

Para que possam desempenhar as atividades, os microrganismos necessitam basicamente de energia, carbono e nutrientes (nitrogênio, fósforo, enxofre, potássio, etc.). No crescimento celular é utilizado o substrato e os nutrientes e o processo pode ser descrito em uma forma simplificada na equação (1):



Em relação à fonte de carbono, há fundamentalmente dois tipos de organismos: os denominados *heterotrófos*, cuja fonte de carbono é o carbono orgânico, e os *autotrófos*, cuja fonte de carbono é o carbono inorgânico (CO<sub>2</sub>). A maior parte das bactérias nos lodos ativados são heterotrófas e desenvolvem a função de remoção da matéria orgânica carbonácea ou remoção da Demanda Química de Oxigênio (DQO), apresentando uma alta taxa de crescimento celular, se comparada com a taxa de crescimento das bactérias autotrófas, cuja função é principalmente a remoção da matéria nitrogenada (Olsson e Newell, 1999). Basicamente, podem-se considerar as seguintes duas principais frações de matéria orgânica segundo sua biodegradabilidade: fração rapidamente biodegradável e fração lentamente biodegradável.

Os principais mecanismos biológicos que ocorrem no processo de lodo ativado são:

- Hidrólise: Os compostos orgânicos de maiores dimensões ou lentamente biodegradáveis sofrem uma conversão para moléculas menores mediante uma reação catalisada pelas exoenzimas, de forma que possam ser absorvidos pela membrana celular. Esta reação enzimática é denominada hidrólise. O produto final da hidrólise se apresenta na forma rapidamente biodegradável, para ser consumido de forma similar à matéria solúvel dentro da célula. A taxa do processo de hidrólise é lenta, se comparada

com a taxa de crescimento da biomassa, sendo ela um fator limitante para o crescimento, principalmente quando o esgoto bruto consiste em moléculas grandes.

- Crescimento da biomassa: O crescimento da biomassa ocorre por fissão dos microrganismos e pode acontecer em poucos minutos sob condições favoráveis, sendo o tempo requerido para cada fissão denominado tempo de geração. Portanto, o crescimento é função do número de microrganismos (massa ou população) num dado instante. A taxa de crescimento da biomassa é influenciada pelo nutriente limitante ou pelas concentrações de substrato.
- Decaimento da biomassa: Biomassa é perdida mediante decaimento, que incorpora um grande número de mecanismos incluindo metabolismo endógeno, morte, predação e lise. O decaimento bacteriano é a transformação da biomassa ativa em substrato lentamente biodegradável e parte do decaimento bacteriano é considerado inerte, devido ao processo da hidrólise ser muito lento comparado ao tempo de retenção do lodo em uma ETE típica.

### **2.1.2 Remoção de Matéria Carbonácea**

A remoção de carbono orgânico solúvel ocorre principalmente pelo crescimento aeróbico ou anóxico de uma classe de microorganismos chamados heterotrófos. O carbono orgânico é reduzido à biomassa adicional ou a dióxido de carbono em forma solúvel e gasosa, e a outra fração do carbono orgânico é oxidada para prover energia. O crescimento aeróbico ocorre quando oxigênio está disponível e o crescimento anóxico quando o nitrato é utilizado pelos microorganismos como fonte de oxigênio. O carbono orgânico insolúvel deve primeiramente ser convertido em carbono orgânico solúvel por hidrólise, em uma reação enzimática catalisada por enzimas secretadas pela biomassa. Esses processos são ilustrados na figura 1:

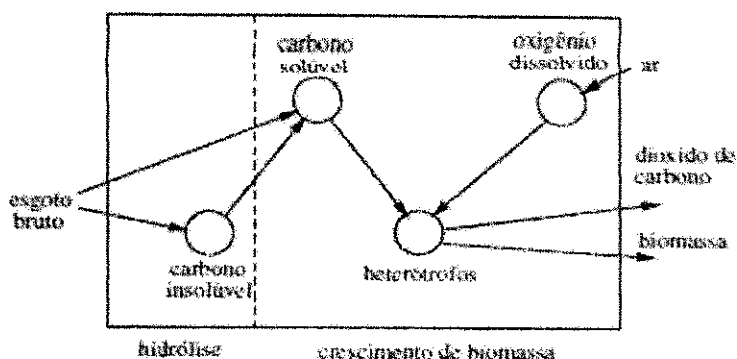


Figura 1: Principais reações na remoção de carbono orgânico (Olsson e Newell, 1999)

Para a remoção de matéria carbonácea, o pH na faixa de 6 a 9 é tolerável, sendo que valores próximos da neutralidade são favoráveis para esse processo. Um valor comumente usado de concentração de oxigênio dissolvido é de 2 mg/L, e que deve ser suficiente para que o crescimento dos microorganismos heterotróficos não seja limitado devido a falta de oxigênio (Olsson e Newell, 1999). Em relação às substâncias tóxicas, os microorganismos heterotróficos responsáveis pela remoção da DBO podem tolerar altas concentrações dessas substâncias, quando comparadas com microorganismos responsáveis pela oxidação da amônia (Metcalf e Eddy, 2003).

### 2.1.3 Remoção de Matéria Nitrogenada

O nitrogênio presente no afluente está principalmente na forma de amônio e este é removido em duas etapas, nitrificação e desnitrificação, processos que podem ser observados na Figura 2:

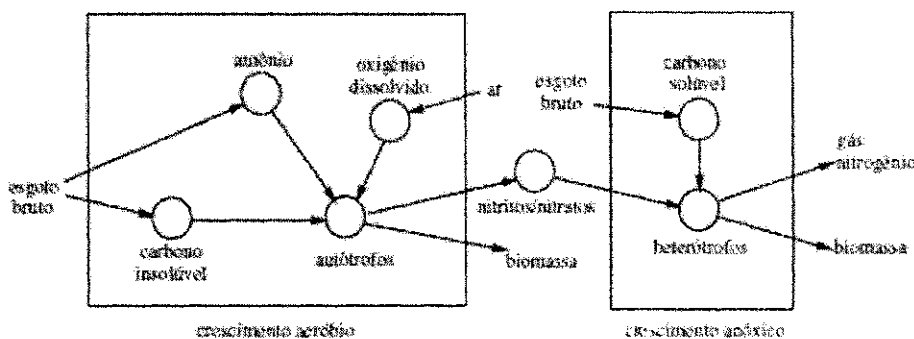
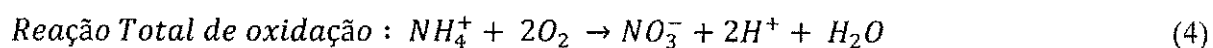
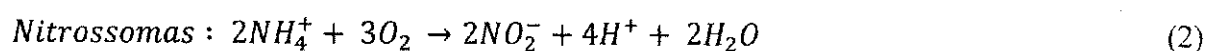


Figura 2: Principais reações na remoção de nitrogênio (Olsson e Newell, 1999)

A nitrificação é um processo autotrófico, ou seja, os organismos utilizam dióxido de carbono (carbono inorgânico) para a síntese celular. A taxa de crescimento dos



microorganismos autotróficos é significativamente inferior ao rendimento celular dos processos heterotróficos e ainda mais sensíveis a condições ambientais (Olsson e Newell, 1999). Dois gêneros de bactérias são responsáveis pela nitrificação, *Nitrosomonas* e *Nitrobacter*. *Nitrosomonas* oxidam a amônia a um produto intermediário: o nitrito. O nitrito é convertido a nitrato pelas *Nitrobacter*. As Equações 2 e 3 representam as reações de conversão realizadas pelas bactérias *Nitrosomonas* e *Nitrobacter*, respectivamente. Estas bactérias utilizam a energia obtida a partir destas reações para o crescimento e manutenção celular. A reação global para a obtenção de energia é descrita pela Equação 4.



Para fins de modelagem em processos de lodos ativados, o processo de conversão a nitratos é considerado como um processo de um passo.

O processo de nitrificação é afetado pelas condições do meio em que ocorre, salientando-se a importância da temperatura e do oxigênio dissolvido. O efeito da temperatura para os organismos nitrificantes é significativo. Assim, para cada acréscimo de aproximadamente 7°C na temperatura, a taxa de crescimento dobra e, inversamente, cada queda de 7°C implica na redução da taxa de crescimento à metade (Von Sperling, 2000), sendo o intervalo ótimo para o processo de nitrificação de 25 °C a 35 °C. O oxigênio dissolvido constitui um substrato limitante quando presente em baixas concentrações. De acordo com Metcalf e Eddy (2003) para concentrações inferiores a 0.5 mg·L<sup>-1</sup> a taxa de nitrificação é fortemente inibida. Segundo Olsson e Newell (1999) a concentração de OD ideal deverá sempre ser um balanço entre o fator econômico e a necessidade para o processo biológico.

Existem muitos indicadores que na zona aeróbica ocorra uma simultânea nitrificação e desnitrificação, pois a concentração de OD não é completamente uniforme no floco, sendo que a desnitrificação ocorre no interior do floco enquanto que a nitrificação ocorre no exterior do floco.

A desnitrificação é a segunda etapa na remoção de nitrogênio por nitrificação-desnitrificação. A remoção de nitrogênio na forma de nitrato por conversão a nitrogênio

gasoso pode ser realizada biologicamente em condições anóxicas, sendo o nitrato utilizado como agente oxidante em lugar do oxigênio. A conversão de nitrogênio na forma de nitrato em uma forma de fácil remoção pode ser realizada por vários gêneros de bactérias: *Achromobacter*, *Aerobacter*, *Alcaligenes*, *Bacillus*, entre outras. Estas bactérias são heterotróficas capazes de realizar uma redução dissimilatória do nitrato em um processo de duas etapas. O primeiro passo é a conversão do nitrato a nitrito. Este estágio é seguido pela produção de componentes intermediários: óxido nítrico, óxido nitroso e nitrogênio gasoso de acordo com a Equação 5. Os três últimos componentes são produtos gasosos, os quais podem ser liberados para a atmosfera.



Nos sistemas de desnitrificação, a concentração de oxigênio dissolvido é um parâmetro crítico. Na presença de OD, os microorganismos utilizam o oxigênio ao invés do nitrato como aceptor de elétrons, devendo assim ser mantido em um nível mínimo, para que não ocorra a inibição do processo de desnitrificação (Olsson e Newell, 1999; Metcalf e Eddy, 2003). A concentração de OD contido na recirculação de nitrato também deve ser minimizada, de forma que tenha um comprometimento entre a quantidade necessária para a nitrificação na zona aeróbica e o limite desejado para o processo de desnitrificação na zona anóxica. Por outro lado, deve-se garantir a concentração de nitrato na zona anóxica através do reciclo para garantir a completa reação de desnitrificação. Outro fator que influencia no processo de desnitrificação é a concentração de carbono orgânico no afluente cuja função é ser utilizado como fonte de energia no processo, e que durante um período de baixa concentração, uma fonte extra de carbono como metanol pode ser adicionada (Olsson e Newell, 1999).

Além das concentrações de substrato rapidamente biodegradável e de nitrato, temos a concentração de amônio como concentração limitante para o crescimento das bactérias heterotróficas desnitrificantes. No entanto, a quantidade requerida de amônio para crescimento celular é muito pouca porque a bactéria heterotrófica é capaz de usar nitrato na falta de amônio para este fim. Sendo assim, a concentração de amônio impõe uma limitação relativamente pequena, pelo que é desconsiderada (Lara, 2005).

## 2.1.4 Transferência de Oxigênio em Sistemas de Lodo Ativado

Nos reatores biológicos, os fenômenos de transferência de massa são muito importantes, dado que a velocidade a que ocorrem pode influenciar ou até controlar a taxa de crescimento microbiano e a taxa de conversão de reagentes em produtos. A transferência de massa pode ocorrer através de diferentes processos, tais como: por difusão molecular, por convecção e através de uma película. O estudo da transferência de oxigênio, visa otimizar o tratamento biológico de efluentes, possibilitando obter maior eficiência na remoção da matéria orgânica e nutrientes, em menor tempo, atentando aos custos de implantação e operação.

A quantidade de oxigênio transferida do ar para água por unidade de tempo é determinada pela solubilidade do oxigênio na água, pela passagem através da interface ar/água e pela difusão do oxigênio na água. O oxigênio é um gás com baixa solubilidade em meio líquido, por esta razão é necessário acelerar o processo natural de dissolução, gerando mecanismos que façam com que a sua concentração na água aumente artificialmente, até que a taxa de fornecimento se iguale à taxa de consumo pelas bactérias.

O objetivo central de um sistema de agitação é acelerar esse processo natural. Assim, o que se visa é transferir o oxigênio da fase gasosa para o líquido e fazer com que este oxigênio dissolvido chegue às células suspensas penetre nestas células e finalmente, seja consumido na reação. Segundo Ramalho (1983) o processo de transferência de oxigênio da fase gasosa para fase líquida ocorre em três etapas:

Etapa 1: A saturação da superfície do líquido entre as duas fases (onde  $S_o^*$  é a concentração de saturação do oxigênio). Esta taxa de transferência de oxigênio é muito acelerada desde que a resistência do filme de gás seja desprezível e, portanto, uma etapa nunca controlada.

Etapa 2. A passagem das moléculas de oxigênio através do filme da interface líquida por difusão molecular. Em níveis muito baixos de mistura a taxa de absorção de oxigênio é controlada pela etapa 2. Em níveis mais elevados de turbulência, o filme da interface é quebrado e a taxa de renovação superficial controla a absorção de oxigênio.

Etapa 3. O oxigênio é transferido para o seio do líquido por difusão e convecção.

### 2.1.4.1 Taxa de Transferência de Oxigênio ( $N$ )

A taxa de transferência de oxigênio ( $N$ ) em  $\text{mmolO}_2/\text{L.h}$ , pode ser descrita por:

$$N = K_L a . (S_o^* - S_o) \quad (6)$$

Onde  $k_L$  é o coeficiente de transferência de massa da fase líquida (cm/h),  $a$  é a área interfacial gás líquido (cm<sup>2</sup>/cm<sup>3</sup>),  $k_{LA}$  é o coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio (h<sup>-1</sup>),  $S_o^*$  é a concentração de saturação do oxigênio dissolvido (mmolO<sub>2</sub>/L) e  $S_o$  é a concentração de oxigênio dissolvido no líquido (mmolO<sub>2</sub>/L).

A transferência de oxigênio será máxima ( $N_{max}$ ) quando a concentração de oxigênio dissolvido for zero: O consumo de energia para aeração é inversamente proporcional à diferença que existe entre a concentração de saturação e a concentração na fase líquida, sendo assim, quanto maior a concentração de oxigênio dissolvido na fase líquida, maior será o consumo de energia para manter essa concentração.

A concentração de OD é um importante parâmetro para a operação do sistema de lodo ativado. Caso não seja transferida em concentração adequada pode afetar no desempenho, nas propriedades biológicas e mecânicas do lodo. O valor da concentração de OD abaixo do mínimo pode acarretar prejuízo no sistema de três maneiras: (1) diminuindo a eficiência de remoção dos substratos (material orgânico e material nitrogenado); (2) inibindo o metabolismo das bactérias heterotróficas e autotróficas e (3) prejudicando as características de sedimentação do lodo (Metcalf e Eddy, 2003).

De acordo com equação (6) existem três parâmetros envolvidos na taxa de transferência de oxigênio: o coeficiente de transferência de massa da fase líquida ( $kL$ ), a área interfacial ( $a$ ) e a força motriz definida por ( $S_o^*-S_o$ ). Como experimentalmente é difícil determinar os valores de ( $kL$ ) e ( $a$ ) separadamente, opta-se pela determinação do coeficiente volumétrico de transferência de massa, ( $kLa$ ) sendo este definido pelo produto entre o coeficiente de transferência de massa da fase líquida com a área interfacial. O  $kLa$  é usado para avaliar a capacidade de arejamento num reator. Este coeficiente depende do tipo de reator usado e das condições de operação, aumentando com o aumento da velocidade de agitação. O  $kLa$  é um dos principais parâmetros necessários ao dimensionamento de uma unidade de tratamento de águas residuárias e serve como referência para a eficiência do processo de aeração sobre diferentes condições operacionais e de geometria do sistema.

#### 2.1.4.2 Teorias de Transferência de Massa

Várias teorias procuram descrever a transferência de massa entre a fase líquida e gasosa entre elas temos:

##### - Teoria dos dois filmes:

Teoria proposta por Lewis e Whitman em 1924, sugere que a interface gás-líquido possui dois filmes, um na fase líquida e outro na fase gasosa, que causam a resistência da

transferência do gás para a fase líquida. As principais hipóteses para o desenvolvimento dessa teoria são: fluxo massa do volume ocorrendo ao longo de ambos os lados da interface gás-líquido, desconsiderado o acúmulo de massa nos filmes, uma vez que esse é muito pequeno; regime permanente e; estabelecimento instantâneo das condições de equilíbrio entre a fase líquida e gasosa na interface, considerando que não há escoamento nos filmes, ocorrendo transferência tão somente por difusão molecular. A teoria dos dois filmes é a mais antiga e mais simples, servindo como base para os modelos avançados.

- Teoria da penetração:

Higbie postulou a teoria da penetração em 1935, quando considerou o sistema de dois filmes na interface para um estado transiente, sendo a passagem pelo filme líquido, a etapa controladora do processo de transferência de oxigênio. Quanto mais curto for o tempo de contato, maior será a taxa de transferência de oxigênio. Podendo ser percebido em processo de aeração quando aumentado a mistura na interface gás-líquido.

- Teoria da renovação superficial:

Shiau (1995) ampliou a teoria da penetração, considerando o caso em que porções do líquido estariam na interface por tempo finito e devido à turbulência, o tempo de contato dos elementos líquidos estaria aleatoriamente distribuídos. Supôs ainda que houvesse uma taxa de produção de superfície nova por unidade de superfície disponível, e essa taxa era independente da idade do elemento líquido em questão.

#### 2.1.4.3 Principais fatores que influenciam na transferência de Oxigênio

Diversos fatores como temperatura, intensidade da mistura e os constituintes na água influenciam no coeficiente global de transferência de massa  $K_{La}$  (Metcalf e Eddy, 2003).

- Temperatura e coeficiente de transferência de massa

O aumento da temperatura diminui a solubilidade dos gases no líquido, isso porque as partículas estão em grande agitação, tornando-as mais difíceis de dissolver, além do que o aumento da temperatura influencia negativamente no metabolismo dos microorganismos responsáveis pela conversão da matéria orgânica. Portanto a variação da temperatura influencia na transferência de massa gás-líquido.

De acordo Metcalf e Eddy (2003) através da equação (7), o coeficiente de transferência de massa global obtido em uma temperatura qualquer no meio líquido é relacionado com o coeficiente à temperatura ambiente (20°C).

$$K_{La(T)} = K_{La(20)} \cdot \theta^{T-20} \quad (7)$$

Onde:  $K_{La(T)}$  é o coeficiente de transferência de massa gás-líquido global a uma certa temperatura T;  $K_{La(20)}$  é o coeficiente de transferência de massa gás-líquido a 20°C ;  $\theta$  é o fator de correção que varia entre 1,015 e 1,040.

- Intensidade da mistura e coeficiente de transferência de massa

Os efeitos da intensidade da mistura devem ser considerados em projeto porque os dispositivos de aeração são freqüentemente escolhidos com base na eficiência, a qual está fortemente relacionada com  $K_{La}$  associado a uma determinada unidade de aeração. A determinação do coeficiente de transferência de oxigênio é normalmente, realizada em relação à água limpa. No caso de águas residuais, a correção dos parâmetros cinéticos é importante para o dimensionamento e escolha de equipamentos de aeração. O fator de correção  $\alpha$  é usado para estimar o valor de  $K_{La}$  em um sistema:

$$\alpha = \frac{K_{La} (\text{águas residuais})}{K_{La} (\text{água limpa})} \quad (8)$$

Os valores de  $\alpha$  variam entre 0,3 a 1,2 segundo Metcaf e Eddy (2003).

- Efeitos das características das águas residuais

O fator de correção  $\beta$  é usado para descrever a influencia das características das substâncias dissolvidas e sólidos suspensos na água residuária, comparando à capacidade de transferência do equipamento de aeração para água limpa, corrigindo a concentração de saturação  $So^*$  sendo:

$$\beta = \frac{So^* (\text{águas residuais})}{So^* (\text{água limpa})} \quad (9)$$

O valor de  $\beta$  comumente usado em tratamento de águas residuais variam em torno de 0,7 a 0,98 Metcaf e Eddy (2003).

#### 2.1.4.4 Metodologias usadas na determinação do coeficiente volumétrico de transferência de massa, $kLa$

Há diversas metodologias para a determinação do coeficiente volumétrico de transferência de oxigênio ( $kLa$ ) em reatores biológicos , destacando-se os métodos do sulfito, dinâmico e o da pressão.

O primeiro método é a oxidação do sulfito de sódio onde a formação de sulfato de sódio faz com que todo o oxigênio transferido seja consumido pela reação. Conhecendo-se o

tempo de reação e a quantidade de sulfito adicionado consegue-se calcular a quantidade de oxigênio transferido para a fase líquida e, portanto, o  $k_{La}$ .

O segundo método de determinação de  $k_{La}$  é o método dinâmico. O oxigênio é primeiramente desorvido da fase líquida no reator biológico através do borbulhamento de nitrogênio no meio líquido. Após atingir concentração de oxigênio igual a zero, o fluxo de nitrogênio é interrompido e imediatamente inicia-se aeração do meio líquido com uma vazão conhecida. A curva de oxigênio dissolvido em função do tempo é tratada e o valor de  $k_{La}$  é obtido por ajuste do modelo a dados experimentais.

O terceiro método é método do degrau de pressão. Nesse método a mudança na concentração de oxigênio é induzida através de mudança na pressão no reator biológico.

#### 2.1.4.5 Função da transferência de Oxigênio em estado não estacionário

Segundo Khudenko e Shpirt (1986) para testes em estado transiente, a taxa média de acumulação de oxigênio no líquido  $\frac{dC_i}{dt}$  igual-se a taxa média efetiva de transferência de oxigênio,  $N$  e para qualquer instante dado pode ser descrita pela seguinte equação:

$$\frac{dC_i}{dt} = N = (K_L a)_T (S_{O_{st}}' - S_{O_i}) \quad (10)$$

Onde  $(K_L a)_T$  é dado pela equação (7),  $S_{O_{st}}'$  é a concentração saturada de oxigênio na água suja,  $S_{O_i}$  é a concentração de oxigênio na água no momento  $t$ .

Conforme ocorre a execução da aeração o valor efetivo da concentração saturada  $S_{O_{st}}'$  muda com a mudança na fração de moles de oxigênio devido ao esgotamento do ar borbulhado através da água. Uma vez que esse esgotamento é em função de  $S_{O_i}$  e  $K_{La}$ , a equação (10) não pode ser resolvida entre os limites  $t = 0, S_{O_i} = S_{O_0}$  e  $t \rightarrow \infty, S_{O_i} = S_{O_{\infty}}$  por simples separação de variáveis. Contudo para um pequeno incremento de  $S_{O_i}$  que ocorrem em um curto intervalo de tempo  $\Delta t$ , o valor de  $S_{O_{st}}'$  pode ser assumido constante. A equação (10) pode ser resolvida como:

$$(K_L a)_T = \frac{1}{\Delta t} \ln \frac{S_{O_{st}}' - S_{O_i}}{S_{O_{st}}' - S_{O_{(i+\Delta t)}}} \quad (11)$$

Nessa equação o valor de  $S_{O_{st}}'$  pode ser aproximado pela seguinte expressão:

$$S_{O_{st}}' = \beta S_{O_{so}} \frac{P_{atm} + h/2}{P_{atm}} \left( 1 - \frac{\delta_c}{2} \right) \quad (12)$$

Onde  $h$  é expresso em metros de água,  $SO_{so}$  é a solubilidade do oxigênio na água limpa na pressão atmosférica normal e  $\beta$  é o fator descrito na equação (9). O termo  $(1 - \frac{\delta_c}{2})$  conta para o esgotamento de oxigênio do ar utilizado para o arejamento.

A fração de oxigênio transferido do ar para a água  $\delta_c$ , no momento em que a concentração de oxigênio dissolvido se iguala a  $SO_i$  pode ser encontrada com a seguinte relação:

$$\begin{aligned} \delta_c &= \frac{\text{taxa de transferência de oxigênio}}{\text{taxa de alimentação de oxigênio}} \\ &= \frac{(K_L a)_T (SO'_{st} - SO_i) V}{I \cdot j \cdot A_T} \\ &= \frac{(K_L a)_T (SO'_{st} - SO_i) H}{I \cdot j} \end{aligned} \quad (13)$$

Onde  $H$  é a profundidade do líquido,  $I$  é a intensidade da aeração ou fluxo volumétrico de ar por unidade de área superficial,  $j = 299$  ou seja a quantidade de oxigênio em  $g/m^3$  de ar ( $T = 0^\circ C$ , pressão atmosférica normal),  $V$  é volume do tanque de aeração e  $A_T$  é a área superficial do tanque. Fazendo a combinação da equação (12) e (13) temos:

$$SO'_{st} = \frac{\beta SO_{so} \left[ 1 + \frac{(K_L a)_T SO_i H}{2Ij} \right]}{\frac{P_{atm}}{P_{atm} + h/2} + \frac{(K_L a)_T \beta SO_{so} H}{2Ij}} \quad (14)$$

As equações (13) e (14) incorporam os efeitos dos parâmetros hidrodinâmicos e físico-químicos,  $H$ ,  $h$ ,  $I$ , etc., diretamente na concentração de saturação de oxigênio, bem como no valor do coeficiente de transferência de massa, o qual também depende desses mesmos parâmetros.

As equações (11) e (14) descreve o aumento da concentração de oxigênio na água aerada durante em estado não estacionário.

#### 2.1.4.6 Analise Dimensional

Os principais parâmetros geométricos e dinâmicos de um sistema de aeração de ar difuso estão ilustrados na figura. 3.



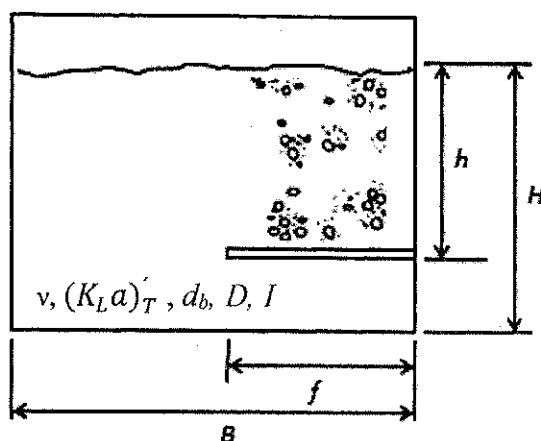


Figura 3: Esquema geral de um sistema de aeração de ar difuso.

Onde  $v$  representa a viscosidade cinemática da água,  $D$  é o coeficiente de difusão molecular,  $B$  a largura do tanque,  $H$  é a altura do tanque,  $h$  é a altura submersa do aerador,  $f$  é a largura do aerador,  $d_b$  o diâmetro da bolha ( ver Painmanakul et al. 2009 para detalhes do cálculo deste parâmetro),  $I$  a intensidade da aeração e  $(K_L a)'_T$  o coeficiente de transferência de oxigênio.

Assumindo que  $(K_L a)'_T$  depende dos parâmetros geométricos e dinâmicos ilustrados na figura 3, assim como de  $\alpha$  a seguinte expressão pode ser escrita como:

$$(K_L a)'_T = F(d_b, h, H, f, B, I, v, D, g, \alpha) \quad (15)$$

sendo  $g$  a aceleração da gravidade

Segundo Khudenko e Shpirt (1996) para tornar o calculo conveniente de  $(K_L a)'_T$  podemos transformar esta relação em:

$$(K_L a)'_T = 0,041 \alpha \theta \left(\frac{h}{d_b}\right)^{0,67} \left(\frac{f}{B}\right)^{0,18} \left(\frac{I}{H}\right) \quad (16)$$

## 2.2 Modelos

### 2.2.1 Modelo BSM1

O BSM1 (Benchmark Simulation Model n.1) é um simulador dinâmico desenvolvido pelo programa europeu COST/IWA 624 para avaliar o desempenho de diferentes estratégias de controle em ETEs. O simulador representa um processo típico de lodo ativado em uma configuração de fluxo contínuo que combina nitrificação com pré-desnitrificação para remoção de carbono e nitrogênio. O benchmark inclui o layout do processo, os modelos fenomenológicos usados e os parâmetros destes modelos, as características do influente, as

condições iniciais de simulação, um procedimento de teste do comportamento dinâmico do processo em malha aberta e critérios de avaliação de performance do sistema controlado. Para uma avaliação consistente, o BSM1 disponibiliza dados das características do afluente, obtidos de condições operacionais reais, para 14 dias de simulação representados em três situações ambientais diferentes: tempo seco, chuvoso e tormenta que pode ser encontrado no site (<http://www.benchmarkwwtp.org>). No mesmo site, no BSM1\_LT, pode ser encontrado os dados para longo prazo o qual considera as variações de temperatura durante essa avaliação.

Observação: Muitos fenômenos que causam problemas operacionais nas ETE são de natureza qualitativa. Alguns deles são provocados por desequilíbrios de microrganismos (lamas espessante filamentosas, espuma filamentosa e ou desfloculação), enquanto alguns são causados por condições de funcionamento indesejáveis (aumento de lodo). Atualmente, esses problemas não podem ser considerados em modelos de simulação de benchmark (BSMs), que são baseados em algoritmos de controle e modelos numéricos. A inclusão de um modelo de risco para os BSMs com base em aspectos qualitativos fornece uma "terceira dimensão" para a avaliação de estratégias de controle, ou seja, os custos operacionais, a qualidade do efluente e riscos operacionais, e, portanto, resultados em geral mais realistas mas que não será foco deste trabalho.

O modelo usa um reator com cinco compartimentos com uma zona anóxica (2 reatores) e zona aerada (3 reatores) e um sedimentador secundário. O modelo do tipo ASM 1 (Activated Sludge Models) é utilizado para o processo biológico, e o decantador secundário é modelado com um processo não reativo com 10 camadas unidimensionais usando o modelo de velocidade de sedimentação de exponencial dupla proposto em Takács (1991). Um layout simplificado do processo é mostrado na Figura 4.

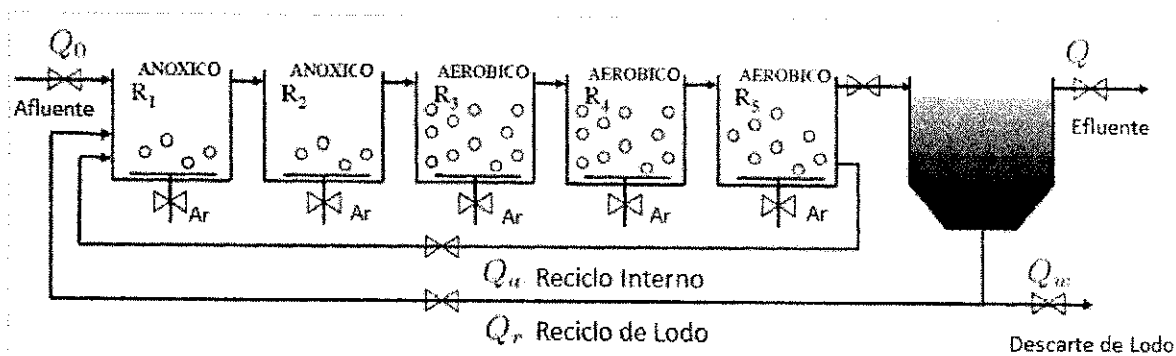


Figura 4: Layout geral da planta BSM1

### 2.2.2 Modelo ASM1

No modelo ASM1 adotou-se o formato matricial e a notação simplificada para representar a cinética e a estequiometria de cada processo que se admite ocorrer no sistema de lamelas ativadas. No ASM1 existem 13 componentes ou concentrações, 19 parâmetros (anexo III – Tabela 13 e 14 respectivamente) e descreve 8 processos biológicos diferentes. Do total de componentes do ASM1, 7 são concentrações solúveis e 6 são concentrações particuladas. A matriz inclui, para cada processo,  $j$ , e para cada componente,  $i$ , os respectivos coeficientes estequiométricos,  $v_{ij}$ , bem como a taxa de processo,  $\rho$ : para cada componente, a taxa de reação pode ser obtida considerando os coeficientes estequiométricos dos processos envolvidos e as respectivas taxas de processo. A matriz pode ser visualizada no anexo III – Tabela 13 assim como os valores dos parâmetros estequiométrico e cinéticos adotados nesse trabalho.

Temos as seguintes considerações para o modelo ASM1 segundo Jeppsson (1997):

O modelo ASM1 inclui uma abordagem baseada no fracionamento da matéria orgânica, atendendo à biodegradabilidade. A matéria orgânica não biodegradável (solúvel e particulada, respectivamente  $S_I$  e  $X_I$ ) passa pelo sistema sem sofrer qualquer alteração: o substrato particulado é geralmente removido através da purga de lamelas enquanto que a matéria solúvel abandona o sistema com o efluente da ETE.

No que se refere à matéria orgânica nitrogenada, o ASM1 considera o seu fracionamento em matéria não biodegradável (solúvel e particulada,  $S_{NI}$  e  $X_{SI}$ ) e em matéria biodegradável. A componente  $S_{NI}$  é ignorada pelo modelo, enquanto que a componente  $X_{SI}$  é modelada como uma fração da DQO particulada não biodegradável. A matéria orgânica nitrogenada é subdividida em nitrogênio amoniacal, nitrogênio orgânico solúvel e nitrogênio

orgânico particulado. A nitrificação é modelada como um processo que ocorre numa só etapa (ou seja,  $\text{NO}_3^-$  é a única forma oxidada de nitrogênio presente).

O modelo integra ainda a alcalinidade,  $S_{Alk}$ , a fim de prever alterações de pH associadas a reações envolvendo a adição/remoção de espécies com a capacidade de remover prótons. A inclusão da alcalinidade nos balanços de massa permite avaliar se a produção de alcalinidade durante a desnitrificação é suficiente para manter o pH constante, independentemente da libertação de prótons associada à nitrificação. Caso não seja, é necessário, por exemplo, proceder à adição de cal para manter o pH.

São 8 os processos que ocorrem no ASM1 descritos a seguir e que podem ser visualizados na tabela 1 :

**1. Crescimento aeróbio da população heterotrófica ( $X_{BH}$ ).** Este crescimento ocorre devido ao consumo de substrato ( $S_s$ ), em presença de oxigênio, tendo como resultado a produção de nova biomassa e a formação de  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ , sendo a concentração de substrato e oxigênio dissolvido fatores limitantes para esse processo de crescimento. O crescimento é modelado utilizando a cinética de Monod. O nitrogênio removido sob a forma de amônio destina-se à síntese de proteínas, sendo incorporado em nova biomassa. Esse processo é o contribuinte principal de nova biomassa e remoção de DQO.

**2. Crescimento anóxico da população heterotrófica ( $X_{BH}$ ).** Este processo é idêntico ao crescimento aeróbio (1), no entanto a respiração é baseada na desnitrificação, utilizando o nitrato como aceitador final de elétrons.

**3. Crescimento aeróbio da população autotrófica ( $X_{BA}$ ).** Amônia é oxidada a nitrato pelo processo de nitrificação, resultando na produção de biomassa autotrófica. A amônia também é utilizada como fonte de nitrogênio. O processo tem efeito na alcalinidade, provocado tanto pela conversão de amônia em biomassa bem como pela oxidação da amônia em nitrato, e na demanda de oxigênio. Essa taxa de crescimento também pode ser modelada pela cinética de Monod.

**4. Decaimento heterotrófico.** O decaimento da biomassa é modelado através de reações de primeira ordem relativamente à concentração de biomassa. Este processo ocorre em quaisquer condições ambientais e inclui diversos mecanismos (respiração endógena, morte, predação e lisis), resultando na conversão da biomassa em  $X_S$  (que volta a ser hidrolisado, havendo reciclagem do substrato) e em  $X_P$  (matéria orgânica particulada inerte, ou seja, detritos celulares). No ASM1, é admitido o conceito pragmático de “morte-regeneração”, em que se assume que não ocorre utilização de receptor de elétrons durante o decaimento da biomassa, pelo que a taxa de decaimento é independente das condições ambientais. A parcela do

oxigênio consumido usualmente associada ao decaimento é calculada como se resultasse, indiretamente, do crescimento de nova biomassa a partir do substrato libertado no processo de decaimento.

**5. Decaimento autotrófico.** Este processo ocorre de forma idêntica ao processo de decaimento da biomassa heterotrófica.

**6. Amonificação.** Este processo converte o nitrogênio orgânico solúvel biodegradável em amônia em processo de primeira-ordem mediado pelos micro-organismos heterotróficos ativos.

**7. Hidrólise de compostos orgânicos.** Neste processo ocorre a hidrólise da matéria orgânica de degradação lenta  $X_s$ , produzindo substrato rapidamente biodegradável  $S_s$  disponível para o crescimento celular. O processo é modelado a partir da cinética de reação de superfície e ocorre somente sob condições aeróbicas e anóxicas. A taxa de hidrólise é reduzida sob condições anóxicas e comparada com condições aeróbicas pelo fator  $n_h$  ( $<1$ ). A taxa é de primeira ordem com respeito à biomassa heterotrófica, sendo saturada quando a quantidade de  $X_s$  retirada se torna maior que a proporção de biomassa

**8. Hidrólise do nitrogênio orgânico.** Este processo é responsável pela hidrólise do nitrogênio orgânico particulado biodegradável em nitrogênio orgânico solúvel em uma taxa definida pela reação de hidrólise, como definida para os compostos orgânicos.

Tabela 1: Processos Básicos do ASM1

Processos	Reações Básicas
Crescimento Aeróbico dos Heterotróficos	$S_s + S_o + S_{NH} \rightarrow X_{BH}$
Crescimento Anóxico dos Heterotróficos	$S_s + S_{NO} + S_{NH} \rightarrow X_{BH}$
Crescimento Aeróbico dos Autotróficos	$S_o + S_{NH} \rightarrow X_{BA} + S_{NO}$
Decaimento dos Heterotróficos	$X_{BH} \rightarrow X_p + X_s + X_{ND}$
Decaimento dos Autotróficos	$X_{BA} \rightarrow X_p + X_s + X_{ND}$
Amonificação do nitrogênio orgânico solúvel	$S_{ND} \rightarrow S_{NH}$
Hidrólise de compostos orgânicos	$X_s \rightarrow S_s$
Hidrólise do nitrogênio orgânico	$X_{ND} \rightarrow S_{ND}$

### 2.2.3 Modelo do Sedimentador Secundário

Plantas com processo de lamas ativadas tem como objetivo transformar a matéria orgânica em biomassa. Apesar de normalmente se dar mais importância aos reatores nos sistemas de lamas ativadas, o sedimentador secundário desempenha também um papel fundamental no tratamento de efluentes. Depois do efluente deixar os reatores, onde ocorreu o tratamento biológico, é necessário separar a água tratada das lamas biológicas. O funcionamento eficaz do processo requer que a biomassa seja removida da corrente líquida em um decantador secundário.

A sedimentação das partículas é alcançada por ação da gravidade, juntamente com as diferenças de densidade entre as partículas e o líquido. Parte da biomassa é purgada, enquanto uma grande parte é devolvida ao reator biológico para manter a proporção de substrato para a biomassa apropriada. Isto significa que o decantador combina funções de clarificação e espessamento em uma unidade conforme mostra a figura 5.

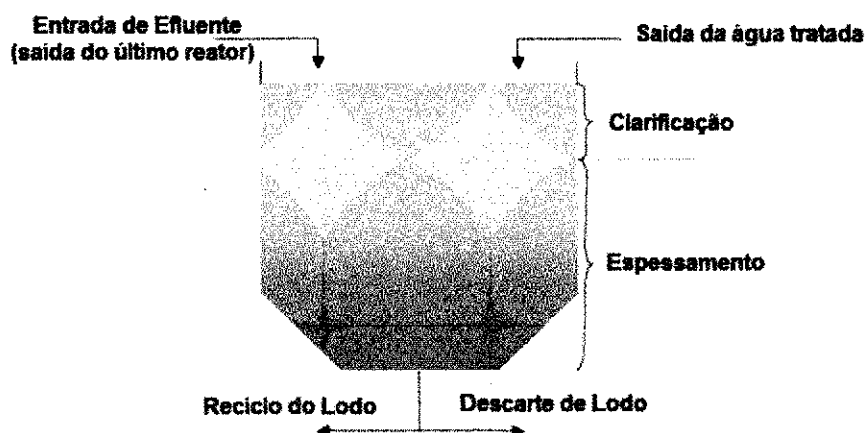


Figura 5: Processo do Sedimentador Secundário

A sedimentabilidade das lamas e a sua concentração no reator, que governam a função de espessador, também determinam a vazão e a carga diárias que podem ser tratados numa determinada estação. Para uma determinada estação, o efluente em condições de chuva determina a taxa máxima de corrente superficial no sedimentador. O tipo de água residual e massa diária de material orgânico tratado determina a concentração de lamas no reator. Na verdade, a função de espessador desta unidade de tratamento limita a capacidade de tratamento da estação.

A função de clarificação tem recebido muito menos atenção que a anterior, apesar de ser igualmente importante. A eficiência de um sedimentador na sua função de clarificação

depende da capacidade de capturar a massa de lamas que nele entra. De um modo geral, grande parte da biomassa que entra no sedimentador deposita e retorna ao reator biológico. A remanescente fração, que compreende as partículas mais pequenas e lentamente sedimentáveis, tem um efeito maciço na qualidade do efluente. Uma falha na função de clarificação pode significar o não cumprimento da qualidade de efluente final, mesmo estando o tanque a funcionar perfeitamente como espessador e os reatores estarem a conseguir a eficiência do processo biológico pretendida.

Nos decantadores secundários desenvolvem os seguintes regimes de sedimentação distintos:

- *Sedimentação discreta, não floculenta*: ocorre na zona de clarificação, incidindo sobre as partículas sem tendência para flocularem. Uma vez que as partículas sedimentam individualmente, o regime segue a lei de Stoke.
- *Sedimentação discreta floculenta*: ocorre na zona de clarificação, na proximidade da entrada de afluente (onde a velocidade se reduz), afetando as partículas dispersas com grande tendência para flocularem, que formam flocos de maior volume, com maior velocidade de sedimentação. Este regime não é ainda perfeitamente compreendido, dada a existência de flocos filamentosos e esféricos com comportamentos distintos.
- *Sedimentação em manto de lamas* (chamado de “zone settling”): verifica-se na zona intermédia, onde existe interação entre os flocos individuais de partículas devido à elevada concentração de biomassa, não sendo válida a aplicação da lei de Stoke. Nesta zona, as forças interpartículas contrariam a sedimentação das partículas vizinhas, ficando estacionárias relativamente umas às outras e sedimentando como um todo – deste modo, é possível captar partículas de menores dimensões, que sedimentariam com velocidades inferiores, e que decantam à velocidade do conjunto. A teoria do fluxo descreve a decantação em manto de lamas e permite estimar a velocidade de sedimentação em função da concentração da biomassa.
- *Sedimentação por compressão*: verifica-se no fundo dos decantadores sendo necessário, para que os flocos densos sedimentem, que o líquido seja “empurrado” para cima. Assim, o mecanismo presente nesta zona inclui uma combinação de lama que se desloca no sentido descendente (por compactação) e de líquido que se desloca no sentido ascendente, de forma a libertar o espaço que será ocupado pela lama. O conhecimento desta situação, em termos de modelação, é ainda incipiente.

Quanto a velocidade de sedimentação, a teoria do fluxo define que esta está em função da concentração da biomassa, considerando que os sólidos que afluem ao decantador secundário estão sujeitos a um fluxo gravitacional de sedimentação,  $J_s$ , e a um fluxo de líquido (ascendente ou descendente, que se deve à saída de efluente decantado ou à extração de lamas do fundo do sedimentador),  $J_B$ . Assim, o fluxo total,  $J_T$ , que representa a produção de sólidos por unidade de área e por unidade de tempo, é dado por (17) :

$$J_T = J_s + J_B = v_s X + UX \quad (17)$$

em que:

$v_s$  - velocidade de sedimentação (m/s);

$U$  - velocidade de recirculação da biomassa devido ao fluxo de líquido (m/s);

$X$  - concentração das lamas (mg/L).

Os modelos assumem, em geral, perfis horizontais de velocidade uniformes e consideram que os gradientes horizontais da concentração são desprezáveis, e apenas modelam os processos na direção vertical. Estes modelos admitem que o caudal afluente ao decantador secundário é homogeneamente distribuído numa camada horizontal (correspondente à camada de entrada), dividindo-se depois numa corrente ascendente e noutra descendente. As características específicas do tanque (formato da entrada e da saída, seção circular ou retangular) não são discriminadas, não sendo portanto consideradas neste tipo de modelos.

O comportamento complexo do decantador secundário e sua importância para o bom funcionamento do sistema de lodos ativado tornaram o processo de sedimentação um grande desafio para os pesquisadores que trabalham no campo de modelagem matemática. Por essa razão, vários modelos estão presentes na literatura e uma boa revisão sobre as diferentes abordagens de modelagem é dada em Jeppsson (1996).

Em termos de simulações, o modelo por excelência é o da dupla exponencial (Takács et al., 1991). O modelo da dupla exponencial surge para dar resposta ao problema de existirem num tanque sedimentador zonas de concentrações de sólidos muito distintas. Há a zona do fundo do tanque onde a concentração de sólidos é muito elevada e ao mesmo tempo há o topo do tanque onde é retirado o efluente clarificado com uma concentração de sólidos muito baixa.

O modelo se baseia em balanços mássicos no interior do próprio sedimentador, que é dividido em camadas. Estas são agrupadas de acordo com a sua posição relativa à camada



onde é introduzido o efluente que vem do último reator. A estrutura das equações resultantes, que tem duas exponenciais (de onde provém o nome do modelo), permite contemplar as situações com uma elevada concentração de sólidos (abaixo da alimentação) ou seja na zona de espessamento, bem como com uma concentração de sólidos pequena (acima da alimentação) que é a zona de clarificação. Impõe ainda a limitação de passagem de sólidos para uma camada inferior caso esta tenha atingido uma concentração limite (que depende do tipo de lamas) e estabelece que uma camada inferior não pode ter uma concentração de sólidos inferior à que se encontra imediatamente acima, para que o modelo seja consistente em termos físicos. Este tipo de limite origina equações não diferenciáveis. No entanto, ao usar-se este modelo num processo de otimização, não são previstos os eventos de pico. Por essa razão, o sedimentador obtido deste modo não é robusto.

Neste modelo assume-se um sedimentador unidimensional, o qual é dividido em dez camadas de igual espessura. São consideradas algumas simplificações: considera-se que não há reações biológicas neste tanque, o que significa que a concentração de matéria dissolvida se mantém sempre constante ao longo de todas as camadas; é considerado apenas fluxo vertical ascendente e descendente; os sólidos são distribuídos uniformemente ao longo de toda a área transversal da camada de alimentação. O modelo considera também apenas uma variável de estado para os componentes particulados.

Na Figura 6 é apresentada, graficamente, a velocidade de sedimentação obtida pelo modelo de Takács. Nesta figura distinguem-se quatro zonas:

- I) a velocidade de sedimentação é nula, pois a concentração de SST atinge o valor mínimo,  $X_{min}$ ;
- II) a velocidade de sedimentação aumenta com o incremento da concentração de SST, sendo fortemente influenciada pela natureza flocculante dos sólidos – o comportamento do modelo depende do valor do parâmetro  $r_p$ ;
- III) a velocidade de sedimentação é independente da concentração de SST, dado que se admite que as partículas atingiram a dimensão máxima, assumindo o valor  $vo'$ ;
- IV) a sedimentação por compressão é o processo dominante e o comportamento do modelo depende do valor do parâmetro  $r_h$ .

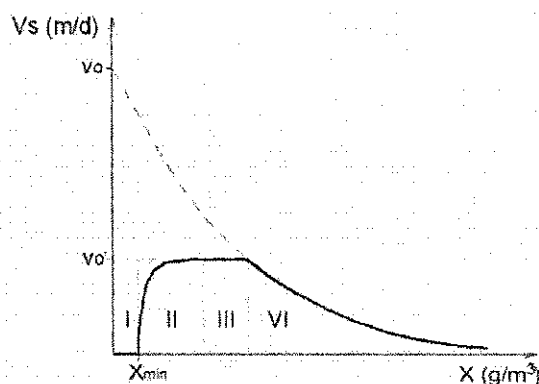


Figura 6: Representação gráfica da velocidade de sedimentação obtida pelo modelo Takács.

O lodo descartado pelo sedimentador secundário deverá ter uma disposição tendo várias alternativas para este fim. Entre elas podemos destacar as mais utilizadas atualmente e as mais viáveis ambientalmente. Uma das alternativas mais usada é o aterro sanitário entretanto, com a crescente preocupação com as questões ambientais (gera impactos negativos como a emissão de metano na atmosfera), o quase esgotamento da capacidade dos aterros atuais e a escassez de área para a construção de novos aterros vêm se tornando inviável além de ser um processo oneroso.

Uma das técnicas utilizadas como alternativa de tratamento de lodo produzidos nas estações de tratamento é a compostagem. A compostagem é o processo aeróbio de decomposição biológica da matéria orgânica, produzindo um produto estável que poderia ser utilizado da agricultura como condicionador de solo, mas é um processo com elevados gastos com energia (aeração) e de mão-de-obra.

Uma solução confiável, segura e ecologicamente correta é a incineração. As plantas de incineração são auto-sustentáveis ao contrário das plantas de secagem que necessitam de uma grande quantidade de combustível. Como outras vantagens podemos citar: menor tráfego de caminhões, somente as cinzas têm que ser transportadas (sem água ou material orgânico); a cinza remanescente é usada, em muitos casos, como material para pavimentação de rodovias ou como matéria-prima para a indústria de cimento; há a possibilidade de se utilizar as cinzas como fertilizante, uma vez que possuem alto teor de fosfato.

A digestão anaeróbica é uma alternativa que propicia o aproveitamento energético do lodo (geração de biogás com elevado conteúdo de metano). A digestão anaeróbia combinada com a queima do biogás é uma alternativa ecológica (sem emissões gasosas e com redução de sólidos voláteis de até 70%)(Metcalf e Eddy, 2003). É uma solução que propicia um lodo final

de volume muito reduzido e isento de patogênicos, podendo ser contabilizado como uma receita.

### 2.3 Balanços de Massa

Para cada compartimento ( $k$ ) dos **reatores**, temos: vazão ( $Q_k$ ), concentração ( $Z_k$ ), taxa de reação ( $r_k$ ) e o volume (reatores anóxidos:  $V_1$  e  $V_2 = 1000\text{m}^3$  e reatores aeróbicos:  $V_3, V_4$  e  $V_5 = 1333\text{ m}^3$ )

- Para  $k=1$

$$\frac{dZ_1}{dt} = \frac{1}{V_1} (Q_a Z_a + Q_r Z_r + Q_0 Z_0 + r_1 V_1 - Q_1 Z_1) \quad (18)$$

$$\text{onde } Q_l = Q_a + Q_r + Q_0 \quad (19)$$

- Para  $k=2$  a  $5$

$$\frac{dZ_k}{dt} = \frac{1}{V_k} (Q_{k-1} Z_{k-1} + r_k V_k - Q_k Z_k) \quad (20)$$

- Caso especial para oxigênio

$$\frac{dS_{O,k}}{dt} = \frac{1}{V_k} (Q_{k-1} S_{O,k-1} + r_k V_k + (K_L a)_k V_k (S_O^* - S_{O,k}) - Q_k S_{O,k}) \quad (21)$$

onde a concentração de saturação do oxigênio é  $S_O^* = 8\text{g.m}^{-3}$  (Alex *et al*, 2008)

Temos ainda as seguintes considerações:

$$Z_a = Z_5 \quad (22)$$

$$Z_f = Z_5 \quad (23)$$

$$Z_w = Z_r \quad (24)$$

$$Q_f = Q_5 - Q_a = Q_e + Q_r + Q_w = Q_e + Q_u \quad (25)$$

O sedimentador secundário tem volume de 6000 m<sup>3</sup>, onde não ocorre reação, com uma área (A) de 1500 m<sup>2</sup> e uma altura de 4 m dividida em 10 camadas, ou seja, cada camada  $m$  ( $z_m$ ) é igual a 0.4 m. O ponto de alimentação do sedimentador é feito na camada 6;

O fluxo de sólido devido à gravidade é  $J_s = v_s(X)X$  onde  $X$  é a concentração total de lodo. O modelo da velocidade de sedimentação exponencial dupla proposto por Takács et al., (1991) é:

$$v_s(X) = \max[0, \min\{v'_0, v_0(e^{-r_h(X-X_{min})} - e^{-r_p(X-X_{min})})\}] \quad (26)$$

com  $X_{min} = f_{ns}X_f$ . Os valores dos parâmetros da função de velocidade de sedimentação podem ser observados na Tabela 15 (anexo III).

O primeiro termo exponencial caracteriza a velocidade de sedimentação para partículas grandes, enquanto o segundo é um fator de correção da velocidade que tem em conta as partículas menores e lentas. Para concentrações baixas, a equação (26) é mais sensível a  $r_p$  e dá valores maiores de  $v_s$  à medida que a concentração aumenta. Para concentrações elevadas, esta equação reduz-se praticamente ao primeiro termo exponencial. As zonas de baixas e altas concentrações são separadas por uma região onde  $v_s$  atinge um valor máximo

O balanço de massa para o lodo (componentes particulados) pode ser descrito como:

- Para a camada de alimentação ( $m=6$ )

$$\frac{dX_m}{dt} = \frac{\frac{Q_f X_f}{A} + J_{clar,m+1} - (v_{up} + v_{dn})X_m - \min(J_{s,m}, J_{s,m+1})}{z_m} \quad (27)$$

- Para as camadas intermediárias abaixo da camada de alimentação ( $m=2$  a  $m=5$ )

$$\frac{dX_m}{dt} = \frac{v_{dn}(X_{m+1} - X_m) + \min(J_{s,m}, J_{s,m+1}) - \min(J_{s,m}, J_{s,m-1})}{z_m} \quad (28)$$

- Para a camada base ( $m=1$ )

$$\frac{dX_1}{dt} = \frac{v_{dn}(X_2 - X_1) + \min(J_{s,2}, J_{s,1})}{z_1} \quad (29)$$

- Para as camadas intermediárias de clarificação acima da camada de alimentação ( $m=7$  a  $m=9$ )

$$\frac{dX_m}{dt} = \frac{v_{up}(X_{m-1}-X_m)+J_{clar,m+1}-J_{clar,m}}{z_m} \quad (30)$$

Sendo:

$$J_{clar,j} = \begin{cases} \min(v_{s,j}X_j, v_{s,j-1}X_{j-1}) & \text{se } X_{j-1} > X_t \\ \text{ou} \\ v_{s,j}X_j & \text{se } X_{j-1} \leq X_t \end{cases} \quad (31)$$

- Para o topo ( $m=10$ )

$$\frac{dX_{10}}{dt} = \frac{v_{up}(X_9-X_{10})-J_{clar,10}}{z_{10}} \quad (32)$$

Sendo:

$$J_{clar,10} = \begin{cases} \min(v_{s,10}X_{10}, v_{s,9}X_9) & \text{se } X_9 > X_t \\ \text{ou} \\ v_{s,10}X_{10} & \text{se } X_9 \leq X_t \end{cases} \quad (33)$$

Para os componentes solúveis (incluindo o oxigênio dissolvido), cada camada representa um volume de mistura completa e as concentrações de componentes solúveis são, portanto:

- Para a camada de alimentação ( $m=6$ )

$$\frac{dZ_m}{dt} = \frac{\frac{Q_f Z_f}{A} - (v_{dn} + v_{up})Z_m}{z_m} \quad (34)$$

- Para as camadas  $m=1$  a  $m=5$

$$\frac{dZ_m}{dt} = \frac{v_{dn}(Z_{m+1} - Z_m)}{z_m} \quad (35)$$

- Para as camadas  $m=7$  a  $m=10$

$$\frac{dZ_m}{dt} = \frac{v_{up}(Z_{m-1} - Z_m)}{z_m} \quad (36)$$

Considerando que:

$$v_{dn} = \frac{Q_u}{A} = \frac{Q_r + Q_w}{A} \quad (35) \quad \text{e} \quad v_{up} = \frac{Q_e}{A} \quad (37)$$

e a concentração do reciclo externo ( $Z_r$ ) e no descarte de lodo ( $Z_w$ ) é a mesma da primeira camada ( $Z_1$ ).

Para o cálculo da concentração de lodo na entrada do sedimentador ( $X_f$ ) utiliza-se dados do compartimento 5 ( $k=5$ ):

$$X_{f,k} = 0.75(X_{s,5} + X_{p,5} + X_{l,5} + X_{BH,5} + X_{BA,5}) \quad (38)$$

Para o cálculo da distribuição da concentração dos particulados no reciclo e na vazão de descarte de lodo temos:

$$\frac{X_{S,5}}{X_f} = \frac{X_{S,u}}{X_u} \quad (39)$$

*Observação: A equação (39) é válida também para os demais componentes particulados ( $X_{P,u}$ ,  $X_{I,u}$ ,  $X_{BH,u}$ ,  $X_{BA,u}$  e  $X_{ND,u}$ ). Nota-se que esta suposição implica que a dinâmica das frações das concentrações de particulados na entrada do sedimentador será propagado diretamente para o fluxo ascendente e descendente no sedimentador, sem levar em conta o tempo de retenção normal no decantador.*

O cálculo da idade do lodo (SRT) é baseado na quantidade total de biomassa presente no sistema, ou seja, no reator e sedimentador:

$$SRT = \frac{TX_{fa} + TX_{fs}}{\phi_{fe} + \phi_{fw}} \quad (40)$$

onde  $TX_{fa}$  é o total de biomassa presente no reator e dada pela equação (41):

$$TX_{fa} = \sum_{i=1}^{i=k} X_{f,i} V_i \quad (41)$$

com  $k=5$  e  $X_{f,i}$  de acordo com a equação (38) para cada compartimento  $k$ .

$TX_{fs}$  é o total de biomassa presente no sedimentador e dada pela equação (42):

$$TX_{fs} = \sum_{j=1}^{j=m} X_{f,j} z_j A \quad (42)$$

com  $m=10$  e  $X_{f,j}$  de acordo com a equação (38) para cada camada  $m$

$\Phi_{fe}$  é a taxa de perda de sólidos no efluente dada pela equação (43)

$$\Phi_{fe} = X_{f,m} Q_e \quad (43)$$

$\Phi_{fw}$  é a taxa de perda de sólidos na vazão de descarte de lodo descrita na equação (44):

$$\Phi_{fw} = X_{f,u} Q_w \quad (44)$$

## CAPÍTULO 3

Este capítulo é baseado no trabalho “Systematic Approach to the Design of Operation and Control Policies in Activated Sludge Systems” publicado na revista *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 50, p. 8542-8557, 2011 (Anexo II).

### 3. Introdução

Uma planta industrial possui inúmeras variáveis que podem ser medidas, manipuladas e controladas, abrindo um leque de possibilidades de malhas de controle. O projeto da estrutura de controle deve ser executado de forma que sejam escolhidas as melhores variáveis para medição, manipulação e controle. Outro ponto importante neste trabalho é a definição da maneira como estas variáveis deverão estar interligadas para garantir bom desempenho e controlabilidade da planta. Além da seleção dessas variáveis medidas, controladas e manipuladas e da configuração de interligação entre elas, outro ponto importante é a seleção do tipo de controlador. Estas definições e escolhas fazem parte das decisões estruturais do sistema de controle que, apesar de serem muito importantes, geralmente são tomadas com base em experiências anteriores e práticas comuns de engenharia.

Há um grande número de publicações propondo diferentes estratégias de controle de estações de tratamento de águas esgoto (ETE), muitas delas explorando a relação custo / Simulation Benchmark Modelo No. 1 (BSM1)(Alex *et al*,1999; Coop,2002) visando comparações dessas proposições dentro de um quadro comum. Do lado da otimização, não foram encontrados tantos trabalhos na literatura, tendo alguns artigos publicados utilizando técnicas heurísticas(Stare *et al*,2007;Ingildsen *et al*,2002; Samuelsson *et al*,2007) para otimização formal (Ayesa *et al*,1998; Rivas *et al*,2008; Chachuat *et al*,2001), utilizando um modelo matemático explícito da ETE para o projeto e operação. Muitas configurações com complexidades diferentes de controle têm sido sugeridas, que vão desde simples implementações de PID descentralizados (Alex *et al*,1999; Vrecko *et al*,2002; Ma *et al*,2006; Londong,1992), estratégias de chaveamento (Yong *et al*,2006; Yuan e Keller,2003; Cadet *et al*,2004) e elementos de supervisão “fuzzy”( Cadet *et al*,2004; Serralta *et al*, 2002) para modelos avançados baseados em controle feedforward (Vrecko *et al*,2003) e “gain scheduling” (Carlsson e Rehnstrom,2002). Wahab *et al*.(2009), Machado *et al*.(2009), Samuelsson *et al*.(2007) e Garcia-Sanz *et al*.(2008) discutem uma análise sobre a matriz de ganho relativo (RGA) para decidir o emparelhamento entre as variáveis controladas e manipuladas pré-selecionadas, sendo essa as únicas contribuições, pelo menos para nosso



conhecimento , que utilizaram esse tipo de ferramenta analítica para triagem de configuração de controle.

Duas características comuns entre as publicações acima mencionadas incluem o uso de uma fonte externa de carbono como um meio para ajudar no controle de nitrato, e da maneira heurística para selecionar saídas controladas e seus respectivos valores nominais. A utilização de uma fonte externa de carbono é sugerida por diversos autores (por exemplo, Alex et al.(2008)), principalmente porque é necessária nos processos de desnitrificação, a fim de manter uma satisfatória relação carbono / nitrogênio. No entanto, em muitos casos, a composição do esgoto afluente já tem uma relação tão favorável, e as mais "tradicionais " variáveis manipuladas (intensidade de aeração para reatores aeróbios, a vazão de recirculação interna, taxa de retorno do fluxo de lamas, resíduos e taxa de vazão de lodo) podem ser suficientes para lidar com o controle do estoque de nitrogênio. Além disso, uma estrutura de controle robusta, entre outras coisas, é aquela que é simples e utiliza o número mínimo de variáveis manipuladas para controlar o sistema.

Exceto por Cadete et al.(2004), nenhuma outra referência foi encontrada que explorou a seleção de variáveis controladas para processos de tratamento de águas residuais. No entanto, os autores propuseram uma metodologia de seleção com base em uma análise de sensibilidade (cálculo do ganho no estado estacionário) e não levam em consideração a questão mais importante relacionada com a economia do sistema. A seleção de variável controlada é um passo fundamental em qualquer aplicação de projeto e estrutura de controle e deve ser feito corretamente, considerando os custos envolvidos durante a ocorrência de vários distúrbios que afetam o processo. Esta poderia ser uma razão pela qual muitas estruturas de controle propostas não são economicamente interessantes, devido aos custos de operação muito elevado e valores que excedam os limites regulamentares. Outro fator que pode diminuir a importância de algumas das metodologias de controle propostas por esses autores é a sua complexidade. Estratégias de chaveamento, controle "fuzzy" e "gain scheduling" são exemplos de técnicas que são difíceis de implementar e manter, na prática, especialmente quando aplicado para fins de tratamento de esgoto. Deve-se ter em mente que a regra básica para o controle de tais instalações devem ser sempre "mantê-lo simples", e se isso não for possível, "mantê-lo estruturado" (Nielsen,2001).

Esse capítulo visa projetar sistematicamente uma estrutura de controle para a ETE usando um procedimento de controle de tal forma que o funcionamento econômico ideal possa ser alcançado, respeitando as restrições de regulamentação para a descarga de efluentes. No entanto, não é o objetivo do trabalho comparar a metodologia proposta com estudos

anteriores sobre o assunto, mas sim complementar a já abundante, rica literatura sobre estratégia de controle da ETE bem como estabelecer uma sistemática para a seleção da estrutura de controle ( Skogestad,2004) que não tenha sido aplicada a tais problemas , e que os resultados obtidos por aplicação do referido procedimento esteja em acordo com os achados de nos últimos 10-15 anos. Nesse sentido, as otimizações formais de uma transcrição de estado estacionário (pseudo-estacionário) para o modelo BSM1 são realizados para vários distúrbios importantes que afetam no processo (diferentes condições climáticas), temas discutidos em Alex et al.(2008), que culminou com a seleção da variáveis controladas mais adequadas. Uma análise completa através da matriz de ganho relativa RGA será realizada como parte do projeto da configuração de regulamentação para a definição do emparelhamento das variáveis controladas e manipuladas. A simulação dinâmica será então realizada para ajudar a encontrar pontos de ajuste restantes que atenuam as violações de restrição.

### **3.1 Projeto de Estrutura de Controle do tipo “Plantwide”**

Plantwide Control é o termo em inglês utilizado para o projeto de estrutura de controle de uma planta como um todo (o que poderia ser traduzido como Controle Global de Processos), que envolve a definição da filosofia de controle que será utilizada e as decisões estruturais que devem ser tomadas antes do projeto do controlador em si. Os projetos de estrutura de controle foram executados ao longo da história utilizando algumas regras heurísticas baseadas na experiência com o processo adquirida ao longo dos anos. Isto ocorreu devido ao fato de não terem sido estudadas e desenvolvidas ferramentas teóricas para este fim.

Os problemas de Controle “Plantwide” possuem características que não são encontradas em projetos de sistemas de controle mais simples, como o de uma unidade somente. Entre estas características, podem-se destacar: (I) As variáveis controladas não são tão facilmente definidas como em um projeto de uma simples unidade. (II) Decisões de controle local podem ter grande efeito por toda a planta. (III) O tamanho do problema é consideravelmente grande comparado ao de uma única unidade, o que torna a solução mais complicada. (Stephanopoulos e Ng, 2000).

O sistema de controle de uma planta é normalmente dividido em camadas ordenadas de forma hierárquica, separadas por uma escala de tempo, conforme mostra a Figura 7:

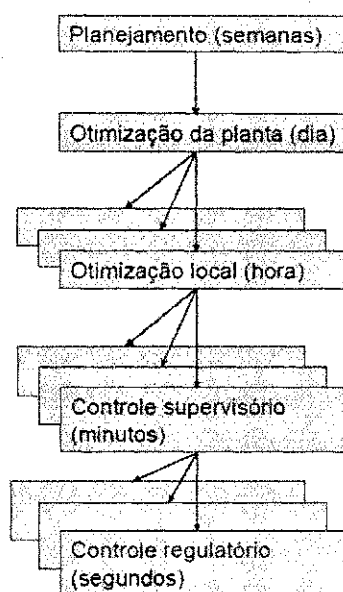


Figura 7: Hierarquia de controle típica de uma planta de processo (Skogestad, 2000).

Nesse tipo de estrutura, os *setpoints* (valores de referência ou desejados) são definidos pelas camadas superiores e implementados pelas camadas inferiores. As variáveis controladas fazem a interligação entre as camadas e, por isso, as escolhas de quais camadas deverão existir e quais variáveis serão controladas tem grande importância no projeto de controle da planta.

Um fator complicador nessas escolhas é que as plantas de processo vêm sendo projetadas cada vez mais integradas energeticamente, com muitas correntes de reciclo e com volumes cada vez menores, aumentando as interações entre as unidades de uma mesma planta.

O projeto de estrutura de controle é definido como decisões estruturais que envolve as seguintes tarefas:

- Seleção das variáveis controladas
- Seleção das variáveis manipuladas
- Seleção das variáveis medidas
- Seleção da configuração de controle
- Seleção dos tipos de controladores

Considerando uma planta em escala real, onde existem diferentes possibilidades de controle, a primeira pergunta que deve surgir é: quais variáveis devem ser medidas, que entradas devem ser manipuladas e que ligação deve ser feita entre eles? Uma resposta a esta pergunta é para selecionar as variáveis que "otimizem o processo"

Skogestad(2004) propõe um procedimento sistemático para o projeto de estrutura de controle “plantwide” com ênfase na seleção das variáveis controladas. Esse procedimento é dividido em duas partes principais:

- Análise descendente (“top-down”) que inclui a definição dos objetivos operacionais, a identificação de variáveis manipulada e graus de liberdade e as variáveis controladas primárias e considerações sobre os graus de liberdade disponíveis para atendê-las (etapas 1 - 4 da tabela 2);
- Análise ascendente (“botton-up”) do sistema de controle começando com a camada de controle estabilizante (etapas de 5-8 da tabela 2).

Tabela 2: Procedimento para projeto de estruturas otimizadas.

Etapa	Comentários, análise de ferramentas e modelos requeridos
<b>(I) Análise descendente ("top-down")</b>	
1. Definição dos objetivos operacionais Identificar restrições operacionais e identificar preferencialmente uma função-custo escalar $J$ a ser minimizada.	
2. Variáveis manipuladas e graus de liberdade Identificar os graus de liberdade estacionários e dinâmicos	Pode necessitar equipamentos extras se a análise mostrar que há poucos graus de liberdade.
3. Variáveis controladas primárias Quais variáveis (primárias) $c$ dever-se-ia controlar? - controlar restrições ativas - Graus de liberdade remanescentes: controlar variáveis cujos "set points" constantes resultem em baixa perda (econômica) quando ocorrerem distúrbios	Análise econômica em estado estacionário: - Definição de custo e restrições - Otimização dos graus de liberdade estacionários para vários distúrbios (fornece as restrições ativas) - Avaliação da perda com "set points" constantes
4. Vazão de produto Onde a vazão de produto deveria ser ajustada? (escolha muito importante pois esta determina a estrutura do sistema de controle de inventário remanescente).	A localização ótima segue da otimização estacionária (etapa 3), mas pode modificar dependendo das condições de operação.
<b>(II) Projeto ascendente ("bottom-up")</b>	
(com variáveis controladas e manipuladas dadas)	Análise de controlabilidade: computar zeros, pólos, vetores dos pólos, ganhos, ganhos dos distúrbios, "relative gain array", mínimos valores singulares, etc.
5. Camada de controle regulatório 5.1. Estabilização 5.2. Rejeição local de distúrbio Propósito: "Estabilizar" a planta usando controladores de "baixa" complexidade (controladores PID de malha simples) tais que: 1- a planta não se desvie muito de seu ponto de operação nominal 2- a camada supervisão (ou os operadores) pode lidar com o efeito dos distúrbios nas saídas primárias ( $y_1 = c$ )	5.1. Análise de vetores de pólo (Havre e Skogestad, 1998) para selecionar variáveis medidas e entradas manipuladas para controle estabilizante. 5.2. Análise de planta parcialmente controladas: controlar medidas secundárias ( $y_2$ ) de forma que a sensibilidade dos estados ( $x$ ) aos distúrbios seja pequena em frequências intermediárias.
Principal problema estrutural: O que mais ( $y_2$ ) se deveria controlar?	Modelo: Modelo dinâmico linear multivariável. Estado estacionário geralmente sem importância
- Selecionar variáveis controladas secundárias (medidas) $y_2$ Pareá-las com variáveis manipuladas $m$ , evitando $m$ 's que saturam (atingam restrições)	
6. Camada de controle supervisorio Propósito: Manter as saídas (primárias) controladas $y_1 = c$ em seus "set points" ótimos usando, como graus de liberdade (entradas), os "set points" $y_2$ , para a camada de controle regulatório e quaisquer variáveis manipuladas não-usadas.	6a. Controle descentralizado: Preferido para processos não-interativos e casos em que as restrições ativas permanecem constantes Análise de pareamento: Parear com RGA próximo à matriz identidade na frequência de "crossover", desde que não seja negativo no estado estacionário. Use CLDG para uma análise mais detalhada
Principal problema estrutural: Controle centralizado ou descentralizado?	6b. Controle multivariável:
6a. Controle descentralizado (malha simples) Possivelmente com adição de "feed-forward" e controle de razão ("ratio") - Pode usar controladores PI ou PID simples - Problema estrutural: escolher o pareamento de entradas e saídas	1- usar para processos interativos e para fácil tratamento de controle "feedforward" 2- usar MPC com tratamento de restrições para mover suavemente durante a mudança de restrições ativas (evita a lógica necessária no esquema descentralizado 5a)
6b. Controle multivariável Usualmente com tratamento explícito de restrições (MPC) Problema estrutural: Tamanho de cada aplicação multivariável	Modelo: Veja item 5
7. Camada de otimização Propósito: Identificar restrições ativas e computar "set points" ótimos $c_j$ para variáveis controladas Principal problema estrutural: É necessário otimização em tempo real?	Modelo: Modelo não-linear em estado estacionário mais custos e restrições
8. Validação	Simulação dinâmica não-linear de partes críticas

### 3.1.1 Definição dos objetivos operacionais e restrições

Os objetivos operacionais devem ser claramente definidos antes de qualquer criação de sistema de controle. Embora isso pareça óbvio, esta etapa é frequentemente ignorada. O estabelecimento correto do objetivo operacional é fundamental para o sucesso da otimização.

Preferencialmente, os objetivos operacionais devem ser relacionados em uma função de custo  $J$  escalar a ser minimizada. Em muitos casos,  $J$  pode simplesmente ser selecionado como o custo operacional, mas existem muitas outras possibilidades. Outros objetivos, tais como restrições devem ser formuladas sendo distinguidas entre restrições transientes e restrições de estado estacionário, sendo que esta última pode ser violada (durante o regime transiente mas não no estado estacionário) e as restrições transientes não devem ser violadas em nenhum momento. (Mulas, 2006).

Nos assumimos que a operação otimizada do sistema pode ser quantificada em termo da função de custo escalar e pode ser encontrada resolvendo o seguinte problema:

$$\min_{u_0} J(x, u_0, d) \quad (45)$$

Sujeito as restrições

$$\begin{aligned} g_1(x, u_0, d) &= 0 \\ g_2(x, u_0, d) &\leq 0 \end{aligned} \quad (46)$$

Onde  $d$  representa os distúrbios exógenos que afetam o sistema, incluindo mudanças no modelo do processo (geralmente representadas por mudanças na função  $g_1$ ), mudanças nas especificações (restrições) e mudanças nos parâmetros (coeficientes) que compõe a função custo (e possivelmente as restrições).  $x$  representa o vetor das variáveis de estado do sistema. Existem também variáveis que podem ser medida  $y = f_0(x, u_0, d)$  e que fornecem informações sobre o real comportamento do sistema durante operação. É importante salientar que  $y$  pode incluir o valor medido dos distúrbios  $d$ , assim como valores conhecidos ou medidos das variáveis independentes  $u_0$ . Uma simplificação que será assumida é que a análise é conduzida em estado estacionário e conseqüentemente o tempo não será considerado variável neste estudo. As restrições de igualdade ( $g_1 = 0$ ) incluem as equações que compõe o modelo do sistema, as quais fornecem a relação entre as variáveis independentes ( $u_0$  e  $d$ ) e as variáveis de estado ( $x$ ) do sistema. Em geral, o sistema deve satisfazer certas restrições de desigualdade ( $g_2$

$\leq 0$ ) como, por exemplo, especificações da composição dos produtos (pureza mínima), restrições impostas às variáveis manipuladas (vazões molares ou mássicas sempre positivas) e outras limitações operacionais (temperaturas e pressões máximas). A função custo  $J_0$  é na maioria dos casos uma função linear simples das variáveis independentes com os valores monetários específicos como parâmetros. Para a maioria dos propósitos é natural formular o problema de otimização como a maximização do lucro  $P$  o qual pode ser formulado como um problema de minimização do tipo  $\min J_0 = -P$ .

Em muitos casos, um subconjunto  $g'_2$  das restrições de desigualdade  $g_2$  é ativo após a otimização, isto é,  $g'_2 = 0$  na solução ótima. A implantação neste caso é geralmente simples: o número de graus de liberdade  $u_0$  é ajustado de forma que as restrições ativas são satisfeitas. Em certos casos, isto consome todos os graus de liberdade disponíveis. Por exemplo, se o problema original é linear, isto é, tem uma função custo linear com restrições lineares em  $g_1$  e  $g_2$ , é conhecido da disciplina de Programação Linear que não restarão graus de liberdade no sistema. Já no caso de problemas não lineares (por exemplo, o modelo do sistema  $g_1$  é não linear), a solução ótima pode ser irrestrita e desta forma tem-se que escolher certas variáveis  $c$  a serem controladas nos seus respectivos valores nominais (aqui chamados "setpoints"),  $c_s$  pelos graus de liberdade restantes no conjunto  $u_0$  de tal forma que a re-otimização do sistema frente a distúrbios não se faz mais necessária. Obviamente, a idéia é de que o valor ótimo de  $c$ , chamado  $c_{opt}(d)$ , dependa muito pouco dos distúrbios  $d$ , de forma que mantendo-se  $c$  neste valor ótimo, a operação (quase) ótima é obtida. Pode-se definir então uma perda  $L$  como a diferença entre o valor atual da função custo obtida com uma estratégia de controle qualquer, por exemplo, ajustando-se  $u$  para manter  $c = c_s$ , e o valor ótimo real da função custo, ou seja,  $L(u, d) = J(u, d) - J_{opt}(d)$ . Esta é a idéia básica em "self-optimizing control".

*Observação: idealmente esta abordagem resultaria em uma situação onde nenhuma re-otimização seria necessária. No entanto, na prática, esporádicas atualizações dos "setpoints"  $c_s$  são conduzidas quando modificações substanciais ocorrerem no processo. Se o conjunto de restrições ativas mudarem após uma re-otimização, então geralmente se deve modificar o conjunto de variáveis controladas  $c$  ou, pelo menos seus "setpoints", pois os ótimos valores relacionados a estas variáveis podem mudar em uma maneira descontínua quando o conjunto de restrições ativas muda.*

### 3.1.1.1 Comentário sobre o controle de restrições ativas

Em alguns casos, não ocorre nenhuma perda em performance com a abordagem onde a camada de otimização é separada da camada de controle. Isso ocorrer quando a operação ótima se encontra exatamente nas restrições. Neste caso, as restrições ativas são controladas, onde as variáveis ativas são aquelas a serem escolhidas como variáveis de controle  $c$  (Maarleveld e Rijnsdorp, 1970). Esta situação é muito comum, pois se o modelo do processo não apresenta fortes características não lineares o ponto de operação ótimo se encontra na intersecção de tantas restrições quantos forem os graus de liberdade disponíveis para otimização (Maarleveld e Rijnsdorp, 1970). Contudo, em muitos casos as restrições mudam dependendo do ponto de operação e uma mudança nas restrições ativas pode requerer uma reconfiguração da malha de controle. Uma solução para evitar este problema, onde as malhas devem ser reconfiguradas, é a instalação, na camada inferior, de um controlador multivariável que explicitamente gerencie mudanças nas restrições ativas. Em particular, controladores preditivos baseados em modelo (MPC) apresentam-se como uma solução simples e eficiente para os casos onde as restrições ativas mudam.

### 3.1.2 Determinação das variáveis manipuladas e dos graus de liberdade do sistema

É de extrema importância a determinação dos graus de liberdade do processo em estado estacionário (definição das variáveis manipuladas), pois esta informação basicamente define o número de variáveis a serem controladas no estado estacionário. Algumas regras práticas descritas em Skogestad (2002) se baseiam na contagem dos graus de liberdade das unidades que compõe o processo e se aplicam a maioria dos processos industriais. Estas regras serão usadas na contagem dos graus de liberdade do processo em estado estacionário usada neste projeto.

Uma maneira simples de identificar estes graus de liberdade é usar um diagrama de fluxo do processo em conjunto com a informação dada na Tabela 3.

Tabela 3: Número típico de graus de liberdade para algumas unidade de processo

Unidade de Processo	Graus de liberdade
Cada corrente de alimentação externa	1 (vazão de alimentação)
Divisor de Corrente	$n-1$ frações de divisão ( $n$ é o número de



Misturador	correntes de saída) 0
Compressor, turbina e bomba	1 (potência)
Vaso de flash adiabático	0 *
Reator em fase líquida	1 (inventário)
Reator em fase gás	0*
Trocador de calor	1 (carga térmica ou área de troca)
Colunas (destilação) excluindo os trocadores de calor	0* + número de retiradas laterais

---

\*Adicionar 1 grau de liberdade para cada pressão fixada (necessário uma nova válvula, bomba ou compressor)

### 3.1.3 Seleção das variáveis primárias de controle

As variáveis primárias de controle  $c$  devem ser selecionadas para assegurar uma (quase) ótima operação da planta em questão. Para isto a técnica de “self-optimizing control” é usada de forma que a idéia é selecionar variáveis que mantidas constantes nos seus respectivos valores ótimos (“set points” ótimos) levem a uma perda econômica aceitável quando a planta é submetida a distúrbios.

Algumas regras qualitativas para a seleção de variáveis primárias de controle usando a técnica de “selfoptimizing control” são dadas por Skogestad (2004b):

1. O valor ótimo de  $c$  deve ser muito pouco sensível a distúrbios.
2.  $c$  deve ser fácil de medir e controlar.
3.  $c$  deve ser sensível a mudanças nos graus de liberdade (em estado estacionário).
4. Para os casos em que existe mais de um grau de liberdade irrestrito, a variável de controle selecionada deve ser independente.

Estas regras fornecem um guia para a seleção de variáveis de controle, mas, por elas mesmas, não possuem informações suficientes. Uma maneira mais precisa de se realizar a seleção é avaliar a perda econômica diretamente, conforme discutido em Skogestad (2000). Para isto, se faz necessário ter em mãos um modelo do processo em estudo. Os passos para esta abordagem são:

- *Passo 1.* Determinar os graus de liberdade destinados à otimização.

- *Passo 2.* Definir o modo de operação através de uma função custo  $J$  sujeita a certas restrições operacionais.
- *Passo 3.* Identificar os distúrbios mais importantes que afetam o processo.
- *Passo 4.* Usar o modelo para determinar o ponto de operação ótimo.
- *Passo 5.* Identificar as restrições ativas (e controlá-las).
- *Passo 6.* Avaliar a perda  $(L(u, d) = J(u, d) - J_{opt}(d))$  para os graus de liberdade restantes, assumindo “set points” constantes para os diferentes conjuntos de candidatas a variáveis controladas.
- *Passo 7.* Avaliar os conjuntos de variáveis controladas que apresentaram perdas aceitáveis quanto à controlabilidade dinâmica e selecionar aquele que apresente melhor desempenho dinâmico.

Uma desvantagem deste método, o qual podemos chamar de método da força bruta, é o grande número de simulações necessárias, principalmente porque não existe limite para o número de conjuntos de variáveis de controle que se pode selecionar na avaliação (Passo 6 acima). Desta forma, é importante limitar o número de variáveis de controle que se pode selecionar para uma avaliação mais detalhada. Um método que pode ser usado é baseado na avaliação do menor valor singular do modelo linearizado e escalonado do processo. Esta regra é conhecida como a regra do menor valor singular (Skogestad e Postlethwaite, 2005) e pode ser descrita da seguinte forma: selecione variáveis de controle  $c$  que maximizem o menor valor singular de  $\sigma(S_1 G J_{uu}^{-1/2})$ , onde  $G$  é a matriz de estado estacionário que representa o modelo linear do processo,  $S_1$  é a matriz de escalonamento das variáveis primárias de controle  $c_i$  e  $J_{uu}$  representa a Hessiana (matriz das segundas derivadas) da função custo em relação às variáveis manipuladas  $u$ .

É bom notar que se está assumindo que o custo é calculado se considerando apenas o estado estacionário do sistema, o que é razoável para a maioria dos casos. O comportamento dinâmico vem à cena somente no Passo 7 acima e, caso o desempenho dinâmico não se mostre satisfatório, uma reavaliação se faz necessária através da repetição dos passos 4 a 7.

### 3.1.3.1 Comentários sobre a seleção de variáveis primárias de controle

Existem basicamente três classes de sistemas onde se pode discutir o método “self-optimizing control”:

- *Classe A.* Sistemas onde nenhum modelo matemático se encontra disponível e onde otimização em tempo real é muito difícil ou impossível. Esta classe de casos é idealmente

apropriada para a técnica “self-optimizing control”. Contudo, como não se possui o modelo do sistema, não se pode usar um método sistemático (como o descrito na seção anterior) para determinar as variáveis controladas. Nestes casos, as variáveis auto controladas, se existirem, devem ser determinadas escolhendo-se diferentes conjuntos e aplicando a técnica diretamente no processo em operação.

- *Classe B.* Sistemas que possuem um modelo matemático, mas que a otimização em tempo real é muito difícil ou impraticável devido ao alto custo de implantação e manutenção. Nestes casos, a técnica de “self-optimizing control” é bastante apropriada e as variáveis controladas podem ser determinadas usando-se os passos descritos na seção anterior. Um modelo matemático genérico é suficiente, pois a seleção de variáveis controladas é uma questão estrutural que geralmente independe dos valores paramétricos específicos.

- *Classe C.* Para sistemas simples que são facilmente modelados e otimizados, o uso da técnica de otimização em tempo real pode fornecer melhores resultados em comparação à técnica de “selfoptimizing control”. Particularmente, estes são os sistemas onde as restrições ativas mudam constantemente de acordo com os distúrbios que afetam o processo.

### 3.1.4 Manipulação da capacidade de produção

A determinação de onde a capacidade de produção dever ser ajustada está intimamente relacionada às limitações de vazão e fluxo de energia no processo. Estas limitações são conhecidas como os gargalos do processo. Além do mais, o local definido para este ajuste afeta diretamente a maneira como os inventários de líquido ou gás das unidades individuais são controladas no processo. Mais precisamente [(Buckley, 1964) e (Price *et al.*, 1994)]:

- (1) Pode-se usar os fluxos à jusante de onde no processo a capacidade de produção é ajustada e
- (2) Pode-se usar os fluxos à montante deste ponto.

Desta forma, dois principais modos de operação podem ser distinguidos:

**Modo I. A capacidade de produção é fixa.** Este modo de operação ocorre quando as vazões de alimentação para o processo são fixas (ou possuem um limite máximo) ou quando a capacidade de produção é fixa ou limitada pelas condições de mercado, por exemplo. Neste modo de operação o objetivo é minimizar o consumo de utilidades (energia) de forma a maximizar a eficiência do processo.

**Modo II. Maximização da capacidade de produção.** Este modo de operação ocorre quando o preço dos produtos e as condições de mercado são favoráveis de forma que é ótimo maximizar a produção.

É prática industrial ajustar a capacidade de produção usando-se os fluxos de alimentação de matérias primas para o processo, caso em que os fluxos à juzante são utilizados para o controle dos inventários. Esta estratégia é razoável se operando no Modo I onde a vazão de alimentação é fixa. No entanto, a vazão de alimentação é em geral um grau de liberdade do processo e freqüentemente as condições econômicas são favoráveis à maximização da capacidade de produção (Modo II). À medida que a vazão de alimentação aumenta o processo invariavelmente irá encontrar um ponto onde alguma restrição será atingida (um gargalo), a partir deste ponto não é mais possível aumentar a vazão de alimentação. Então, de forma a maximizar a capacidade de produção, tem-se que operar o processo com máximo fluxo através deste gargalo. Isto fornece a seguinte regra para o Modo II de operação: *Determine o principal gargalo na planta identificando a máxima vazão de alimentação possível para diversos distúrbios no processo. De forma a maximizar o fluxo através do gargalo, a capacidade de produção deve ser preferencialmente ajustada neste ponto.* Para evitar reconfiguração de malhas de controle, o mesmo manipulador da capacidade de produção deve ser usado quando operando no Modo I.

Contudo, algum cuidado deve ser tomado na aplicação desta regra. Primeiro algumas considerações podem ser importantes, tais como o controle individual de unidades (por exemplo, colunas de destilação) o qual pode ser afetado pelo modo através do qual o controle de inventário é realizado (Luyben *et al.*, 1998). Segundo, a estabilização de uma unidade no processo pode requerer o uso de uma variável de fluxo que foi identificada como sendo o gargalo do processo, prevenindo então a maximização do fluxo através deste gargalo. Terceiro, o gargalo pode migrar de uma unidade à outra dependendo dos distúrbios que afetam o processo. De qualquer maneira, o sistema de controle dever ser projetado de forma que uma operação bem próxima do ótimo desejado seja alcançada.

### **3.1.5 Projeto da camada de controle regulatória**

O controle regulatório é definido como uma camada que possui como principal objetivo a operação satisfatória do processo e que normalmente contém as malhas de controle que devem estar em serviço de forma que a camada supervisória seja capaz de operar de

forma eficiente. O principal objetivo desta camada é facilitar a operação e não otimizar economicamente o processo, tarefa que é realizada pelas camadas superiores.

Geralmente, a estratégia de controle desta camada é descentralizada onde as variáveis de controle medidas  $y_2$  são mantidas nos respectivos “set points”. Outra característica da camada regulatória é que os valores destes “set points” são determinados pela camada supervisória, o que naturalmente constitui um sistema de controle em cascata. Além disso, a ação do controle regulatório deve ser rápida de forma que o controle executado pelas camadas superiores na hierarquia seja mais conservativo (lento). Uma outra importante função desta camada é evitar que o processo se desvie consideravelmente do ponto ótimo de operação, o que resulta na manutenção do processo próximo da região linear, possibilitando o uso eficiente de controladores lineares (Skogestad e Postlethwaite, 2005).

#### 3.1.5.1 Seleção de variáveis para a camada regulatória

Outro assunto importante a ser abordado é a seleção de variáveis de controle ( $y_2$ ) para a camada regulatória. Esta camada é extremamente importante, pois garante a operação “estável” da planta, ou seja, as variáveis  $y_2$  são responsáveis por manterem o processo no estado estacionário desejado pela rejeição de distúrbios. Além da experiência de engenharia, alguns cálculos e simulações se fazem necessárias na decisão final. Algumas regras heurísticas que podem ser úteis na seleção destas variáveis são:

1.  $y_2$  deve ser fácil de medir.
2. O controle das variáveis  $y_2$  deve “estabilizar” o processo.
3.  $y_2$  deve apresentar boas características de controlabilidade, isto é, estas variáveis devem favorecer o bom desempenho dinâmico do sistema.
4.  $y_2$  deve estar localizada “perto” da variável manipulada  $u_2$ . Isto é uma consequência da regra 3 pois para efeito de boas características de controlabilidade, o tempo morto entre estas variáveis deve ser pequeno.
5. O ganho (escalonado) entre as variáveis  $u_2$  e  $y_2$  deve ser grande.

Não é difícil com estas regras básicas determinar as variáveis a serem controladas na camada regulatória. Por outro lado, para controlar  $y_2$  deve-se selecionar um subconjunto de variáveis manipuladas  $u_2$  e para isto as seguintes regras se aplicam:

1. Selecione  $u_2$  de forma que o controle de  $y_2$  seja satisfatório, isto é,  $u_2$  deve ter um “grande” e “direto” efeito em  $y_2$ , onde “grande” significa que o ganho entre as variáveis é grande e

“direto” significa que um bom desempenho dinâmico é conseguido sem resposta inversa e com tempo morto efetivo pequeno.

2. Selecione  $u_2$  de forma a maximizar a magnitude do ganho (escalonado) entre  $u_2$  e  $y_2$ .
3. Evite usar variáveis  $u_2$  que possam saturar durante operação.

### **3.1.6 Controle indireto das variáveis primárias de controle - inclusão de uma camada intermediária**

Geralmente, as variáveis selecionadas pela técnica de “self-optimizing control” (ambas as relacionadas às restrições ativas e as selecionadas pelos graus de liberdade irrestritos do sistema) são composições, as quais são difíceis de medir. Desta forma, juntamente à camada de controle regulatório, pode-se incluir uma camada intermediária entre a camada supervisória e a regulatória com o objetivo de propiciar o controle indireto das variáveis primárias de controle  $y_1$ . Esta estratégia é utilizada para assegurar uma (quase) ótima operação do processo no caso de falha de alguma malha contendo variáveis primárias (composições, principalmente). Como a escala de tempo para o controle de composição é grande, as variáveis  $y_1$  nesta camada intermediária podem ser selecionadas usando-se a regra de maximização do mínimo valor singular baseada em informações do estado estacionário (Skogestad e Postlethwaite, 2005). Em prática, tentasse evitar a inclusão de mais uma camada de controle e a situação ideal seria tal que o controle indireto fosse efetuado com as próprias variáveis da camada regulatória  $y_2$  e com  $u_1$ , onde  $u_1$  representa o conjunto das variáveis manipuladas disponíveis após o fechamento de todas as malhas na camada regulatória.

### **3.1.7 Projeto da camada de controle supervisória**

O objetivo da camada de controle supervisório é manter as variáveis primárias de controle  $y_1$  nos seus respectivos “set points”  $y_{1s}$  usando como graus de liberdade os “set points” das variáveis  $y_{2s}$  e/ou  $y'_{1s}$  nas camadas intermediária e regulatória e qualquer variável manipulada que se encontre disponível. As variáveis de controle nesta camada podem ser determinadas pela técnica de “self-optimizing control”. O principal ponto de discussão sobre a estratégia de controle usada nesta camada está relacionado ao uso de controle descentralizado ou multivariável, como por exemplo, MPC.

O controle descentralizado é mais simples e o mais preferido para processos não interativos e para os casos onde as restrições ativas não mudam com distúrbios. As principais vantagens do controle descentralizado são:

- A sintonia dos controladores pode ser efetuada “on-line”.
- Requer muito pouca informação derivada do modelo do processo.
- É fácil de manter e ajustar.

Por outro lado, as principais desvantagens são:

- A determinação do emparelhamento das variáveis pode ser uma tarefa bastante difícil.
- Existe uma perda de desempenho quando comparado com o controle multivariável.
- Torna-se muito complexa a tarefa de reconfiguração das malhas de controle quando as restrições ativas mudam.

O controle multivariável é preferido quando o processo é bastante interativo e para processos onde as restrições ativas mudam constantemente. Neste último caso, deve-se considerar o uso de um controlador multivariável que explicitamente considere restrições ao processo (por exemplo, MPC). As principais vantagens do controle multivariável são:

- O controle de processos interativos é efetuado de maneira coordenada.
- Torna-se fácil lidar com o controle antecipativo.
- O ajuste é automático quando ocorrem mudanças nas restrições ativas.

As desvantagens são:

- Requer um modelo dinâmico do processo.
- A sintonia do controlador pode se tornar muito difícil.
- Apresenta uma grande sensibilidade a incertezas e mudanças nas condições operacionais.
- Problemas de confiabilidade podem surgir, pois toda a informação é fornecida às camadas inferiores de uma única vez.

### 3.1.8 Projeto da camada de otimização

O propósito da camada de otimização é identificar as restrições ativas e recalcular os “set points” ótimos  $y_{1s}$  para as variáveis primárias de controle. O principal ponto de discussão

neste caso é a real necessidade de se usar otimização em tempo real (RTO). Otimização em tempo real é extremamente dispendioso, pois requer um modelo preciso do estado estacionário do processo que precisa ser mantido e continuamente atualizado. Se as restrições ativas não variarem consideravelmente e as variáveis primárias de controle puderem ser razoavelmente selecionadas pela técnica de “self-optimizing control”, a utilização do RTO torna-se desnecessária.

### **3.1.9 Validação da estrutura de controle proposta**

Após a definição da estrutura de controle a ser utilizada no processo, tornar-se conveniente a validação desta estrutura através de simulações dinâmicas utilizando-se um modelo não linear do processo.

### **3.1.10 Sumário do projeto de estruturas otimizadas de operação**

A estrutura de controle a ser selecionada para o processo deve ser tal que a operação da planta seja a menos complexa possível. Desta forma, a estrutura descentralizada com múltiplos controladores SISO é sempre a preferida devido a sua simplicidade, facilidade de sintonia e aceitação por parte dos operadores. Após a decisão sobre quais variáveis controlar na camada regulatória e supervisória (discutidas nas seções anteriores), o projeto da estrutura descentralizada se torna bastante simples pois a principal decisão a ser tomada é sobre o emparelhamento das variáveis e isto conta com a experiência de engenharia assim como com as ferramentas de simulação disponíveis no mercado. Se uma maior precisão se fizer necessária, pode se basear a análise nos métodos lineares disponíveis, essencialmente aqueles baseados na matriz RGA. Estes métodos fornecem um projeto robusto com boas qualidades de desempenho dinâmico da estrutura final (Skogestad e Postlethwaite, 2005).

## **3.2 Aplicação do Controle Plantwide a uma Planta de Tratamento de Efluente**

### **3.2.1 Análise descendente (“top-down”)**

Nesta seção, definiremos os passos de 1 a 3 do procedimento acima descrito, iniciando com a definição de uma operação ótima. Vale ressaltar que, nesta fase do processo, um modelo não-linear em estado estacionário é o requisito principal, e que a análise se baseia em considerações apenas no estado estacionário.



Os custos operacionais de uma estação de tratamento dependem do sistema de tratamento em si e pode ser dividido em mão de obra, energia, manutenção, uso de produtos químicos, tratamento de lamas químicas e custos de descarte. O objetivo é basicamente reduzir o custo da energia e da disposição final do lodo, tanto quanto possível. Portanto, neste trabalho, os seguintes coeficientes técnicos são considerados:

- Bombeamento devido a energia necessária para o bombeamento ( $E_P$  expresso em KWh/d);
- Bombeamento devido a energia necessária para a aeração ( $E_A$  expresso em KWh/d)
- Energia gasta para a mistura necessária para baixa aeração nos reatores anóxicos ( $E_M$  expresso em KWh/d)
- Disposição do lodo ( $CD$  expresso em gSS /d).

Para expressar os custos parciais ao longo de um determinado intervalo de tempo  $\Theta$  adotamos a expressão proposta em Alex et al (2008). O total de energia necessária para o bombeamento depende diretamente da vazão de reciclo externo ( $Q_r$ ), e do reciclo interno ( $Q_a$ ) e da taxa de fluxo de saída de resíduos de lodo ( $Q_w$ ):

$$E_P = \frac{1}{\theta} \int_{t_0}^{t_0+\theta} (0.004Q_a(t) + 0.008Q_r(t) + 0.05Q_w(t)) dt \quad \left[ \frac{kWh}{d} \right] \quad (47)$$

com as taxas de fluxo em  $m^3/d$ . A energia de aeração pode ser calculada a partir da seguinte função (48) considerando a concentração de saturação do oxigênio,  $S_O^{sat}$ , o volume dos reatores,  $V$  e  $K_{L,i}$ :

$$E_A = \frac{S_O^{sat}}{\theta \times 1.8 \times 1000} \int_{t_0}^{t_0+\theta} \sum_{i=1}^5 V_i K_{L,i} a^{(i)}(t) dt \quad \left[ \frac{kWh}{d} \right] \quad (48)$$

com  $K_{L,i}$  é expresso em  $d^{-1}$  e  $i$  refere-se ao número da zona do reator. As zonas anóxicas (reator 1 e 2) devem ser misturadas para evitar a sedimentação e além do sistema de aeração, agitação mecânica também poderá ser fornecida. A energia de mistura é em função do volume do compartimento:

$$E_M = \frac{24}{\theta} \int_{t_0}^{t_0+\theta} \sum_{i=1}^5 \begin{cases} 0.005 V_i dt & \text{if } K_L a^{(i)}(t) < 20 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \left[ \frac{kWh}{d} \right] \quad (49)$$

A disposição de produção de lodo por dia é expressa como:

$$C_D = \frac{1}{\theta} \int_{t_0}^{t_0+\theta} (TSS_w(t) Q_w(t)) dt \quad \left[ \frac{gSS}{d} \right] \quad (50)$$

Onde  $TSS_w$  representa o total de sólidos suspensos na vazão de fluxo  $Q_w$ . Assumindo um preço constante de energia a  $K_E = 0.09$  \$/kWh e o preço de disposição do lodo de  $K_D = 80$  \$/ton, o custo total do sistema em \$/d pode ser calculado como:

$$Cost = k_E(E_P + E_A + E_M) + k_D C_D \quad \left[ \frac{\$}{d} \right] \quad (51)$$

*Observação: A consideração do fator da violação/ penalidades na função custo somente faz sentido se usarmos alguma forma de otimização dinâmica, como por exemplo MPC ou RTO, o que raramente será aplicado a estações de tratamento de efluentes devido ao alto custo de instalação de sistema de controle avançados como estes.*

A função objetivo global de custo a ser minimizada é dada pela equação (51) para fins no estado estacionário e sujeita a restrições de regulamentação do efluente (legislação) e algumas restrições do processo. Essas restrições estão listadas na tabela 4:

Tabela 4: Restrições do Processo

Restrições	Unidades	Definição
$0 \leq S_{O_2}^{(1,2)} \leq 0.5$	$gO_2/m^3$	Restrição operacional
$1.5 \leq S_{O_2}^{(3,4,5)} \leq 4$	$gO_2/m^3$	Restrição operacional
$7 \leq SRT \leq 20$	$d$	Restrição operacional
$1 \leq S_{NO}^{(2)} \leq 2$	$gN/m^3$	Restrição operacional
$0 \leq DQO^{(eff)} \leq 100$	$g DQO /m^3$	Restrição de regulamentação
$0 \leq TSS^{(eff)} \leq 30$	$gSS/m^3$	Restrição de regulamentação
$0 \leq TN^{(eff)} \leq 18$	$gN/m^3$	Restrição de regulamentação
$0 \leq DBO_5^{(eff)} \leq 10$	$g DBO /m^3$	Restrição de regulamentação

$0 \leq S_{NH}^{(eff)} \leq 4$	$gN/m^3$	Restrição de regulamentação
$0 \leq Q_w \leq 2000$	$m^3/d$	Restrição de manipulação
$0 \leq Q_r \leq 70000$	$m^3/d$	Restrição de manipulação
$0 \leq Q_a \leq 100000$	$m^3/d$	Restrição de manipulação
$0 \leq K_{La}^{(3,4,5)} \leq 360$	$d^{-1}$	Restrição de manipulação

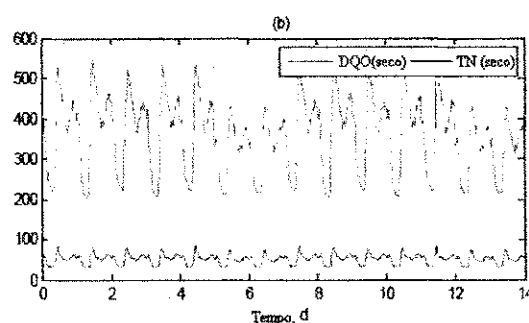
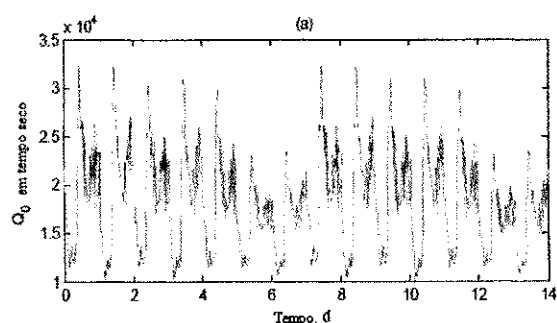
As restrições de concentração de oxigênio  $S_O$  nos reatores anóxicos (1 e 2) são definidas em valores muito baixos ( $< 0.5 gO_2/m^3$ ) para que o processo de desnitrificação não seja inibido (Metcalf e Eddy, 2003). A desnitrificação é um processo microbiológico heterotrófico onde o nitrato é reduzido a nitrogênio gasoso utilizando este como agente oxidante em lugar de oxigênio. Por outro lado, a fim de garantir a degradação da matéria orgânica e boa qualidade e sedimentação do lodo, uma maior concentração de oxigênio é necessária nos reatores aeróbicos (3,4 e 5), no qual o valor superior de  $4 gO_2/m^3$  é usado para melhorar a taxa de nitrificação (Metcalf e Eddy, 2003). O limite inferior para a concentração de oxigênio nos reatores aeróbicos é baseado em Metcalf e Eddy (2003), no qual sugere que nas zonas aeróbicas, o oxigênio não se deve limitar ao crescimento de microorganismos, pois caso contrário os microorganismos filamentosos podem predominar e a sedimentação e qualidade do lodo pode ficar comprometida. Particularmente, esse limite inferior de  $1.5 gO_2/m^3$  foi determinado com base de tentativa e erro até que a convergência da otimização para diversos distúrbios já não era atingida. Os limites de tempo de retenção do lodo (SRT) também foram definidos a partir de Metcalf e Eddy (2003) e refletem na variação sazonal da temperatura da ETE. As restrições de nitrato,  $S_{NO}^{(2)}$ , no reator anóxico 2 são impostas de modo a evitar ou minimizar o uso de uma fonte de carbono externa necessária para o processo de desnitrificação (Olsson *et al*, 2005). Essa estratégia é recomendada por diversos autores como por exemplo por Olsson *et al* (2005) que relata o seguinte: “a recirculação do nitrato deve ser controlada de modo que a concentração do nitrato no final da zona anóxica seja mantida em um nível muito baixo (ou seja,  $1-2 gN/m^3$ ). No entanto, praticamente é sempre difícil provar que uma determinada estratégia produz o melhor desempenho, uma análise do balanço de massa com base no carbono sugere que a estratégia seria maximizar a remoção de nitrato”. As restrições regulamentares do efluentes de  $DQO$ ,  $TSS$ ,  $TN$ ,  $DBO_5$  e  $S_{NH}$  são tomadas a partir Alex *et al* (2008). Os valores para as restrições de manipulação foram retirados Shena *et al* (2008 e 2009).

Consideraremos seis variáveis manipuladas (últimas quatro entradas na Tabela 4), o que corresponde a 6 graus de liberdade dinâmicos, assim como os graus de liberdade no

estado estacionário não são instáveis e precisam ser controlados. Já os níveis nos reatores e no decantador secundário são auto-regulados pela disposição do layout assumido para a planta.

Em comparação com outras indústrias de processo, uma planta de tratamento de esgoto está sujeita a distúrbios muito grande por causa da variação diária, semanal e sazonal no efluente de entrada. Neste trabalho, consideramos os dados de carga do afluente dado pela IWA Task Group no site de referência ( <http://www.benchmarkwwtp.org> ). Os dados são apresentados em termos das variáveis de estado do ASM1 e as taxas de vazão do afluente. Em geral, esses dados refletem a tendência esperada por variações diurnas em dias úteis, que são típicos do comportamento da carga normal de uma instalação de tratamento municipal. Três arquivos de diferentes tempo / condições de afluentes são considerados em três diferentes conjuntos de dados:

- 1 - O arquivo de tempo seco (Figura 8 (a, b)) dá o que é considerado normal em variações diurnas no fluxo e nas cargas de poluentes orgânicos. Em seguida, as composições de entrada e vazão média são consideradas como condições para a planta nominal BSM1.
2. O arquivo de evento de chuva (Figura 8 (c, d)) representa um evento de chuva em um período de tempo longo .
3. O arquivo de evento de tempestade (Figura 8 (e, f)) é uma variação do arquivo de tempo seco incorporando tempestades. O evento da primeira tempestade deste arquivo é de alta intensidade e curta duração. O evento da segunda tempestade assume que os esgotos foram limpos das matérias particuladas durante o evento de primeira tempestade; portanto, apenas um aumento modesto da carga de DQO é observado durante a segunda tempestade.



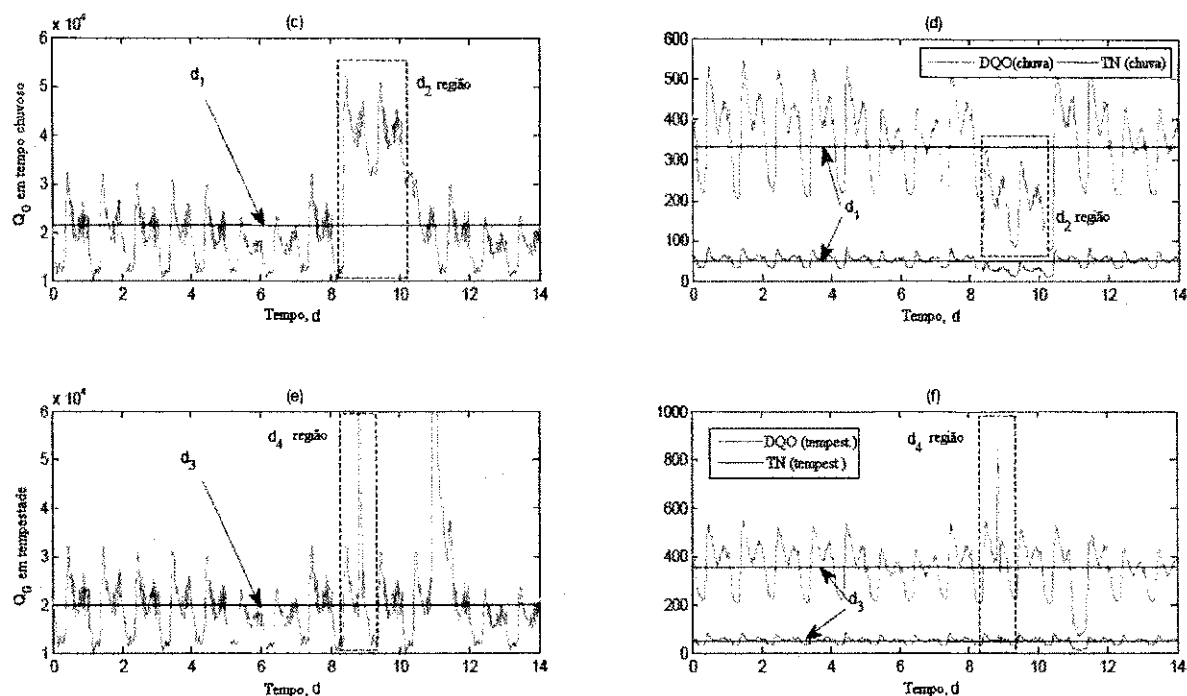


Figura 8: Vazão do afluente e compostos orgânicos e nutrientes para os diferentes eventos meteorológicos.

Partindo das condições nominais, os valores médios de afluente durante o tempo seco, a Tabela 5 resume os distúrbios dados em termos de carga e de vazão do afluente.

Tabela 5: Distúrbios do Processo

	$Q_0$ [ $m^3/d$ ]	$DQO^{(in)}$ [ $gDQO/m^3$ ]	$TSS^{(in)}$ [ $gSS/m^3$ ]	$TN^{(in)}$ [ $gN/m^3$ ]
Nominal	18446	381	211	54
$d_1$	21320	333	183	48
$d_2$	40817	204	116	28
$d_3$	19746	323	195	50
$d_4$	34286	281	101	37

A composição média e vazão,  $d_1$ , e os valores médios para as entradas do processo durante o período de chuvas, marcado como região  $d_2$ , são tomadas a partir da situação meteorológica de chuva na Figura 8 (c, d). A partir da Figura 8 (e, f), podemos identificar os distúrbios dado como  $d_3$  representando a condição média durante todo o período, e  $d_4$  como a média durante o tempo de tempestade. Para simulações dinâmicas, ao testar as configurações

de controle proposto, consideramos todos os três arquivos de tempo de curto prazo acima descritos. Na verdade, uma vantagem especial de estudar este processo é a disponibilidade dos perfis de distúrbios, porque definitivamente ajuda na concepção da estrutura de controle adequada, uma vez que facilita a seleção das variáveis de saída como será visto mais adiante. A importância da modelagem dos distúrbios é bem documentada em Gernaey et al.(2006).

Para atingir o ponto de operação ótimo, primeiro escolhemos controlar as restrições ativas (Maarleveld e Rijnsdorp,1970), enquanto que a difícil questão de decidir quais variáveis irrestritas serão controladas é resolvida recorrendo ao conceito de controle “self-optimizing” (Skogestad,2000). O ponto de partida para a seleção das variáveis primárias (economicas) é a otimização do processo para os vários conhecidos e determinísticos distúrbios já definidos.

O modelo BSM1 é reimplementado como um script em MatLab e as otimizações são executadas para cada uma das condições impostas pelos distúrbios selecionados na Tabela 5 sujeitos às restrições apresentadas na Tabela 4. A subrotina do MatLab "fmincon.m" é o otimizador escolhido. No entanto, como um meio para melhorar a convergência do algoritmo SQP, um escalonamento do modelo foi realizado tendo-se verificado que a Jacobiana das equações do modelo (J) em torno do ponto de operação nominal calculado por Alex et al.(2008) é afetada por um mal condicionamento (número condicional de J,  $\gamma(J)$ , da ordem de  $10^9$ ), e problemas numéricos podem surgir (Lid e Skogestad,2008) (na verdade, isso ocorreu ao tentar otimizar o modelo sem escalamento, e a convergência não pode ser alcançada). O procedimento de escalonamento é amplamente descrita por Braatz e Morari(1994), e um exemplo de sua aplicação é dada na Skogestad e Postlethwaite(2005). O procedimento de escalonamento é descrito no anexo I. Após o escalonamento o número condicional de J foi reduzido de  $\gamma(J) = 2 \cdot 10^9$  para  $\gamma(S_n JS_v) = 5 \cdot 10^4$ , e todas as otimizações convergem dentro de poucos segundos.

Os resultados das otimizações podem ser vistos na Tabela 6, que dá os valores das variáveis selecionadas envolvidas no processo e os efeitos dos distúrbios sobre o custo. Cinco restrições estão sempre ativas, ou seja,  $S_o^{(3)}$  (limite inferior),  $S_o^{(4)}$  (limite inferior),  $S_o^{(5)}$  (limite inferior),  $S_{NO}^{(2)}$  (limite inferior), e  $S_{NH}^{(eff)}$  (limite superior). O fato da concentrações de oxigênio serem ativos em seus limites inferiores já era esperado já que a aeração ( $E_A$ ) é um dos colaboradores principais nos custos de uma planta de tratamento de águas residuais, porque a eficiência da transferência de oxigênio do gás para líquido é relativamente baixa de modo que apenas uma pequena quantidade de oxigênio fornecida é utilizado pelos microorganismos. Pelo

mesmo motivo, a amônia livre é ativa em seu limite superior pois a nitrificação é um processo que demanda oxigênio. Uma explicação razoável para  $S_{NO}^{(2)}$  ser ativo em seu limite inferior é que o sistema tenta maximizar a utilização do afluente biodegradável DQO para a desnitrificação e, portanto, maximiza a remoção de nitrato na zona anóxica. Na verdade, esse resultado confirma que a vazão de recirculação de nitratos deve ser tal forma que  $S_{NO}^{(2)}$ , no final da zona anóxica é mantido em um valor baixo, mas não zero.

Tabela 6: Efeito dos distúrbios em valores ótimos das variáveis selecionadas no sistema.

Variável	Unidade	BSMI	Nominal	d1	d2	d3	d4
<b>Custo</b>	$\$/d$	554.19	518.42	521.59	577.65	512.75	675.19
$E_P$	$\$/d$	34.94	17.95	23.42	58.22	20.01	48.98
$E_A$	$\$/d$	300.72	269.13	272.40	300.98	266.71	346.03
$E_M$	$\$/d$	21.60	21.60	21.60	21.60	21.60	21.60
$C_D$	$\$/d$	196.93	209.74	204.17	196.85	204.43	258.58
$S_O^{(1)}$	$gO_2/m^3$	0.004	0.008	0.009	0.022	0.009	0.015
$S_{NO}^{(1)}$	$gN/m^3$	5.37	3.06	2.81	1.92	2.91	2.26
$S_{NH}^{(1)}$	$gN/m^3$	7.92	12.63	11.55	7.23	11.88	8.66
$S_O^{(2)}$	$gO_2/m^3$	0.0001	0.0001	0.0001	0.0005	0.0001	0.0003
$S_{NO}^{(2)}$	$gN/m^3$	4	1	1	1	1	1
$S_{NH}^{(2)}$	$gN/m^3$	8.34	13.38	12.22	7.61	12.58	9.19
$S_O^{(3)}$	$gO_2/m^3$	1.7	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5
$S_{NO}^{(3)}$	$gN/m^3$	6.54	4.32	3.89	2.25	4.02	2.80
$S_{NH}^{(3)}$	$gN/m^3$	5.55	9.88	9.16	6.32	9.38	7.31
$S_O^{(4)}$	$gO_2/m^3$	2.4	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5
$S_{NO}^{(4)}$	$gN/m^3$	9.30	7.56	6.70	3.46	6.97	4.54
$S_{NH}^{(4)}$	$gN/m^3$	2.97	6.73	6.40	5.11	6.50	5.56
$S_O^{(5)}$	$gO_2/m^3$	0.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5
$S_{NO}^{(5)}$	$gN/m^3$	10.42	10.57	9.33	4.63	9.71	6.19
$S_{NH}^{(5)}$	$gN/m^3$	2	4	4	4	4	4
<b>MLSS</b>	$gSS/m^3$	3269.84	2665.30	2664.10	3250.66	2632.64	3757.92

<i>SRT</i>	<i>d</i>	9.17	14.64	7.57	8.02	9.56	8.17
<i>F/M</i>	<i>gDQO/gSS/d</i>	0.36	0.44	0.44	0.43	0.44	0.43
<i>DQO<sup>(eff)</sup></i>	<i>gDQO/m<sup>3</sup></i>	47.55	45.89	45.34	46.21	45.71	48.38
<i>TSS<sup>(eff)</sup></i>	<i>gSS/m<sup>3</sup></i>	12.50	11.24	12.48	22.51	11.72	20.41
<i>TN<sup>(eff)</sup></i>	<i>gN/m<sup>3</sup></i>	14.05	16.42	15.32	11.61	15.63	12.97
<i>DBO<sub>5</sub><sup>(eff)</sup></i>	<i>gDBO/m<sup>3</sup></i>	2.65	2.52	2.82	4.75	2.64	4.31
<i>S<sub>NH</sub><sup>(eff)</sup></i>	<i>gN/m<sup>3</sup></i>	2	4	4	4	4	4
<i>TSS<sup>(w)</sup></i>	<i>gSS/m<sup>3</sup></i>	6393.98	12536.71	7109.79	6227.72	10022.80	7128.59
<i>S<sub>NO</sub><sup>(w)</sup></i>	<i>gN/m<sup>3</sup></i>	10.42	10.57	9.33	4.63	9.71	6.19
<i>Q<sub>w</sub></i>	<i>m<sup>3</sup> / d</i>	385.00	209.13	358.96	395.12	254.96	453.43
<i>Q<sub>r</sub></i>	<i>m<sup>3</sup> / d</i>	18446.00	4694.10	12143.13	43435.64	6657.56	37061.86
<i>Q<sub>a</sub></i>	<i>m<sup>3</sup> / d</i>	55338.00	37868.37	36289.81	69912.59	39079.90	56268.36
<i>Q<sub>w</sub>/Q<sub>0</sub></i>	-	0.021	0.011	0.017	0.010	0.013	0.013
<i>Q<sub>r</sub>/Q<sub>0</sub></i>	-	1.00	0.25	0.57	1.06	0.34	1.08
<i>K<sub>La</sub><sup>(3)</sup></i>	<i>d<sup>-1</sup></i>	240.00	191.48	193.60	216.42	189.76	244.97
<i>K<sub>La</sub><sup>(4)</sup></i>	<i>d<sup>-1</sup></i>	240.00	165.11	166.59	179.05	163.26	209.11
<i>K<sub>La</sub><sup>(5)</sup></i>	<i>d<sup>-1</sup></i>	84.00	148.15	150.69	169.01	147.18	194.88
<i>Q<sub>0</sub></i>	<i>m<sup>3</sup> / d</i>	18446.00	18446.00	21320.00	40817.00	19746.00	34286.00
<i>DQO<sup>(in)</sup></i>	<i>gDQO/m<sup>3</sup></i>	381.00	381.00	333.00	204.00	323.00	281.00
<i>TSS<sup>(in)</sup></i>	<i>gSS/m<sup>3</sup></i>	211.00	211.00	183.00	323.00	195.00	101.00
<i>TN<sup>(in)</sup></i>	<i>gN/m<sup>3</sup></i>	54.00	54.00	48.00	281.00	101.00	37.00

Ainda na Tabela 6, há uma coluna que mostra os resultados do original BSM1 em estado estacionário, tal como dado por Alex et al(2008). O custo no ponto nominal ótimo é cerca de 7% menor do que o original BSM1 especialmente devido à redução na energia de aeração e, em menor grau, na energia de bombeamento ( $E_P$ ). Segundo Von Spelling (2000) o custo operacional de um sistema de lodo ativado convencional é na média de US\$6,1 (US\$/hab.ano) sendo que com essa redução no custo significaria uma economia de US\$172.000,00/ano em uma cidade como Campina Grande cuja a população é estimada aproximadamente em 400 mil habitantes, por exemplo caso um sistema desse fosse implantado. O distúrbio que mais influencia no custo está relacionado ao tempo de tempestade,  $d_t$ , e a razão para isso é o aumento da carga de DQO (24% maior do que nominal) e nitrogênio amoniacal (22% maior do que nominal) no afluente que por sua vez



aumenta os custos de aeração e de disposição final do lodo. Sob condições ideais, pode-se concluir que os eventos de tempestade tem maior custo de operação do que em eventos de chuva. Como o sedimentador é modelado como um processo não-reativo, a concentração de amônia no efluente corresponde, pelo menos no estado estacionário, ao do último tanque aeróbico, e isto também se aplica para todos os outros componentes solúveis. Na prática, porém, há uma condição anóxica no sedimentador que favorece a desnitrificação ocasionando uma redução de nitrogênio total de cerca de 15% quando comparado ao assumirmos como não-reativo (Germaey *et al*, 2006).

Como as cinco restrições ativas devem ser implementadas para garantir a operação ótima (Maarleveld e Rijnsdorp, 1970), ficamos ainda com um grau de liberdade. Na próxima seção, vamos simular dinamicamente o processo para os três arquivos climáticos com o objetivo de encontrar uma variável controlada adequada que forneça a operação viável no que diz respeito às restrições de regulamentação e, ao mesmo tempo em menor resultado no custo de operação.

### 3.2.2 Análise ascendente (“bottom-up”)

Iniciaremos por decidir sobre a configuração da camada de controle regulatória. Uma das questões principais desta etapa é garantir a “estabilidade” e “suavização” da operação. O termo “estável” não significa só a estabilização matemática dos modelos instáveis (por exemplo, relacionadas ao controle de malha de nível), mas também que a camada de regulamentação deve impedir que a planta se desvie muito de seu ponto ótimo de operação nominal em uma curta escala de tempo e que deve ser concebida de modo que a camada de supervisão (ou operadores) possam lidar com os efeitos dos distúrbios nas saídas primárias. Para o processo de ETE, os níveis são auto-regulados através do excesso de efluente de um tanque para outro, portanto o controle de nível não é uma preocupação, porém o controle de fluxo de ar adicionado às três bacias aeróbico se faz necessário, para garantir que a quantidade certa de oxigênio seja fornecida. Nós também incluímos o controle de fluxo do reciclo interno ( $Q_a$ ) e externo ( $Q_r$ ). No total, teremos então cinco malhas fechadas na camada de controle regulatória.

O objetivo pretendido pela camada de controle supervisória é a de manter as variáveis controladas primárias (econômicas) em seus valores nominais ideais (“setpoints” ótimos), a fim de minimizar os custos operacionais. Como seleção de variáveis, devemos controlar as restrições ativas  $S_O^{(3)}$ ,  $S_O^{(4)}$ ,  $S_O^{(5)}$ ,  $S_{NO}^{(2)}$  e  $S_{NH}^{(eff)}$ . Como um meio de melhorar o controle de  $S_{NH}^{(eff)}$ , é mais prudente controlar  $S_{NH}^{(5)}$  uma vez que o sedimentador pode servir como um

filtro “low-pass” capaz de amortecer grandes variações dinâmicas em  $S_{NH}^{(eff)}$ . Além disso,  $S_{NH}^{(5)}$  não é menos restrição ativa que  $S_{NH}^{(eff)}$ .

Embora o emparelhamento de variáveis controladas com variáveis manipuladas pode parecer óbvio para a ETE, nós aqui realizamos uma análise de ganho relativo (RGA) para verificar as interações das malhas. A matriz RGA no estado estacionário ( $\Lambda(\omega = 0)$ ) de uma malha aberta do modelo linearizado em torno do ponto de operação nominal ótimo é dada na figura 9, onde  $u = [K_L a^{(3)} K_L a^{(4)} K_L a^{(5)} Q_a Q_r]$  e  $y = [S_O^{(3)} S_O^{(4)} S_O^{(5)} S_{NO}^{(2)} S_{NH}^{(5)}]$ . Os números em negrito na figura 9 representam a escolha de emparelhamento para eles, no qual os valores são os mais próximos à unidade.

$$\Lambda(\omega = 0) = \begin{matrix} & K_L a^{(3)} & K_L a^{(4)} & K_L a^{(5)} & Q_a & Q_r \\ \begin{matrix} S_O^{(3)} \\ S_O^{(4)} \\ S_O^{(5)} \\ S_{NO}^{(2)} \\ S_{NH}^{(5)} \end{matrix} & \left( \begin{array}{ccccc} \mathbf{0.841} & 0.008 & 0.002 & -0.013 & 0.161 \\ -0.020 & \mathbf{0.865} & -0.002 & -0.012 & 0.170 \\ -0.029 & -0.045 & \mathbf{0.966} & -0.009 & 0.117 \\ -0.044 & -0.038 & 0.007 & \mathbf{1.062} & 0.013 \\ 0.252 & 0.209 & 0.027 & -0.028 & \mathbf{0.539} \end{array} \right) \end{matrix}$$

Figura 9: RGA no estado estacionário em malha aberta.

A interpretação da RGA em uma frequência “crossover” indica como a dinâmica deve ser considerada no pareamento de entradas e saídas (Skogestad E Postlethwaite,2005) recomendando emparelhamentos para os quais os ganhos relativos para a frequência “crossover” ( $\omega_c$ ) estejam próximos a identidade. Além disso, se os elementos da RGA em torno de  $\omega_c$  são grandes, a planta é inerentemente difícil de controlar, principalmente por causa da sensibilidade a erros nos parâmetros do modelo. Aplicada ao nosso caso, para a frequência onde o controle é importante ou seja para a frequência dos distúrbios ( $\omega \cong 2\pi \text{ rad/d}$ ), a RGA na figura 10 também mostra a mesma escolha de emparelhamento. Observa-se que os elementos da RGA são pequenos e devemos não encontrar nenhum tipo de problema para controlar a planta (Skogestad e Postlethwaite,2005).

$$\Lambda(\omega \cong 2\pi) = \begin{matrix} S_o^{(3)} \\ S_o^{(4)} \\ S_o^{(5)} \\ S_{NO}^{(2)} \\ S_{NH}^{(5)} \end{matrix} \begin{pmatrix} K_L a^{(3)} & K_L a^{(4)} & K_L a^{(5)} & Q_a & Q_r \\ \mathbf{0.864} & 0.012 & 0.007 & 0.010 & 0.150 \\ 0.028 & \mathbf{0.871} & 0.017 & 0.011 & 0.168 \\ 0.021 & 0.038 & \mathbf{0.874} & 0.031 & 0.171 \\ 0.071 & 0.069 & 0.076 & \mathbf{0.861} & 0.039 \\ 0.145 & 0.135 & 0.086 & 0.148 & \mathbf{0.524} \end{pmatrix}$$

Figura 10: RGA para frequência “crossover”.

Alternativamente, pode-se calcular o chamado “número RGA” definida como  $\|\Lambda(G(j\omega)) - I\|_{sum}$  como uma função de frequência, que deverá ser pequeno em torno da frequência “crossover” ( $\omega_c$ ) (Skogestad E Postlethwaite, 2005). No gráfico do número RGA (Figura 11) mostra que em frequências de até 100 rad / d, o pareamento selecionado dá um bom desempenho dinâmico, pois o número RGA é comparável a RGA do estado estacionário ( $\omega \approx 0$ ).

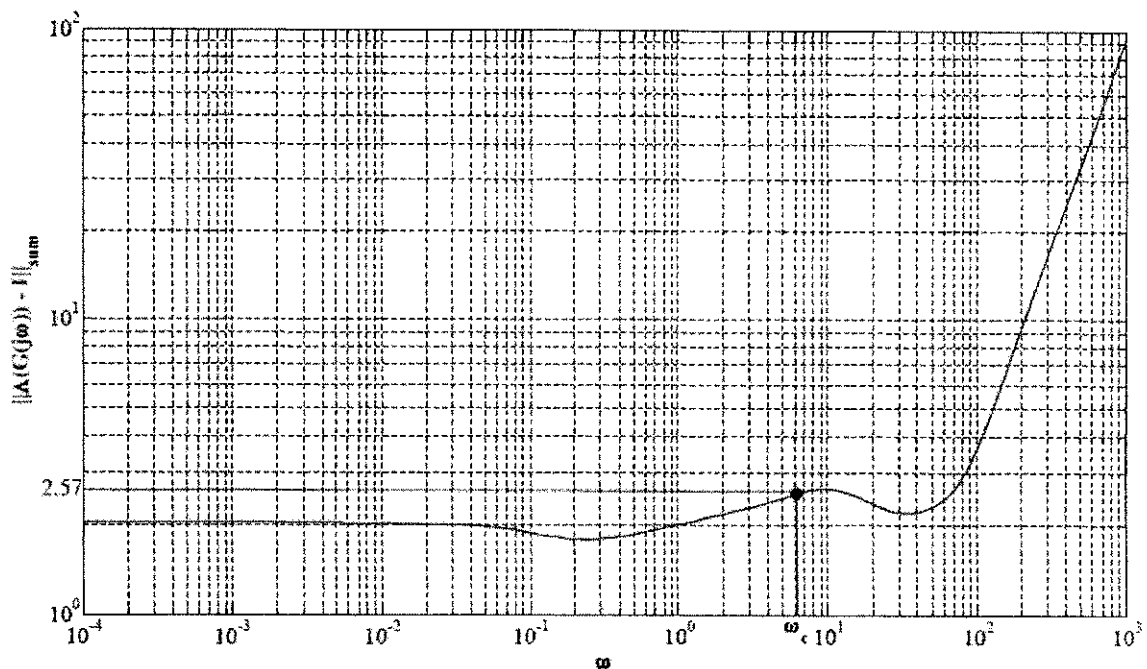


Figura 11: Número RGA do modelo linearizado do processo com uma função da frequência)

A experiência prática pode ser confirmada computando a RGA, o controle de oxigênio nas bacias aeróbicas podem ser feito ajustado desde que os elementos individuais da RGA são próximos à identidade não só no estado estacionário, mas também na frequência de

“crossover” ( $\omega_c$ ), e o mesmo se aplica ao controle de nitrato no último tanque anóxico. O controle de  $S_{NH}^{(5)}$  parece difícil (elemento da RGA próximo a 0.5). No entanto, um controle de oxigênio perfeitamente ajustado tem um bom potencial para rejeitar a maioria dos distúrbios para o nitrato e a amônia no efluentes (tanto na camada de controle de fiscalização), como visto na figura 12 e na figura 13 e na Figura 14, em que assumimos o controle perfeito do  $S_O^{(3,4,5)}$  e computamos a RGA da planta em malha aberta para os demais elementos. Essas RGAs assumindo o controle de oxigênio perfeitamente ajustado permite avaliar o desempenho da malha de controle quando o controle de oxigênio é controlado no set-point por um controlador PI, sendo geralmente um controle fácil e direto. Portanto, o controle de  $S_O^{(3,4,5)}$  pode ser visto como parte de uma camada intermediária de regulamentação para ajudar no controle de amônia de efluentes.

$$\Lambda(\omega = 0) = \begin{matrix} & Q_a & Q_r \\ \begin{matrix} S_{NO}^{(2)} \\ S_{NH}^{(5)} \end{matrix} & \begin{pmatrix} \mathbf{0.960} & 0.040 \\ 0.040 & \mathbf{0.960} \end{pmatrix} \end{matrix}$$

Figura 12: RGA no estado estacionário assumindo o controle de oxigênio perfeitamente ajustado

$$\Lambda(\omega \cong 2\pi) = \begin{matrix} & Q_a & Q_r \\ \begin{matrix} S_{NO}^{(2)} \\ S_{NH}^{(5)} \end{matrix} & \begin{pmatrix} \mathbf{0.902} & 0.040 \\ 0.040 & \mathbf{0.902} \end{pmatrix} \end{matrix}$$

Figura 13: RGA na frequência “crossover” assumindo o controle de oxigênio perfeitamente ajustado.

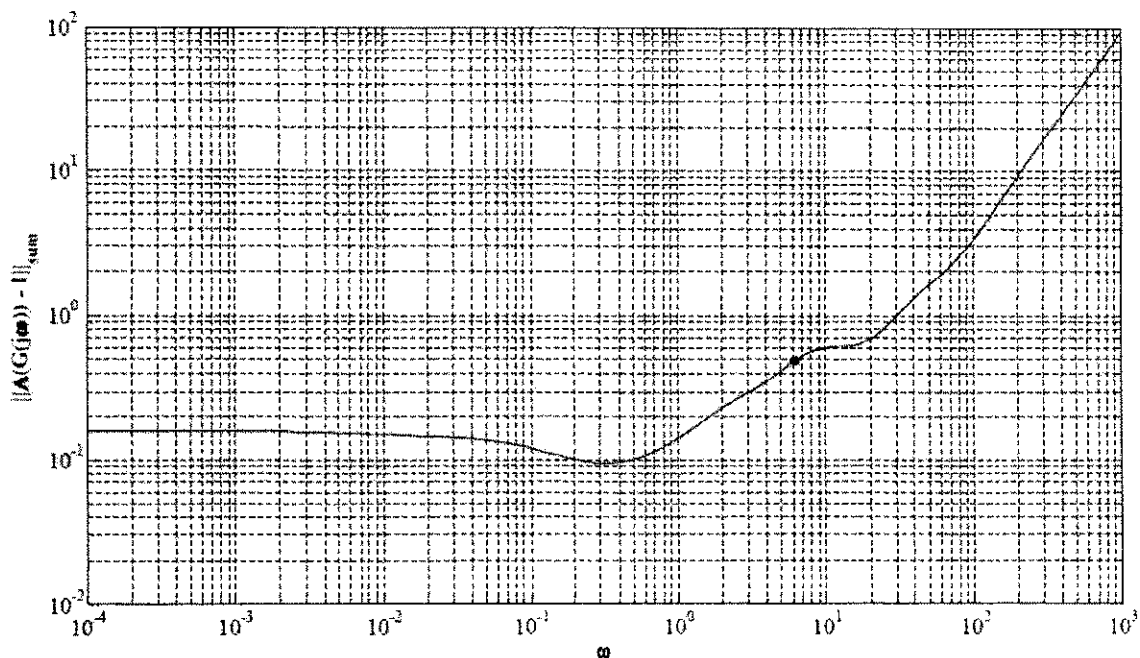


Figura 14: Número RGA com uma função da frequência para o modelo linearizado parcialmente controlado.

Como discutido, há ainda um ultimo grau de liberdade e precisamos encontrar uma variável controlada adequada que forneça o melhor desempenho transitório e econômico, quando ocorrem distúrbios. Para este efeito, vamos usar simulações dinâmicas com malhas fechadas (Figura 15). Para a última variável controlada, optamos por manter  $Q_w$  constante em seu valor nominal ótimo, porque é uma boa estratégia trabalhar com a mínima manipulação. Para as simulações assumimos um sensor ideal para medição de oxigênio, mas com um atraso de 10 min em  $S_{NO}^{(2)}$  e  $S_{NH}^{(5)}$ . Os parâmetros de sintonia do controlador PI é calculado mediante a aplicação da regra de sintonia SIMC que são apresentados na Tabela 7. Além disso, foram incluídos “antiwindup” em todos os controladores PI para evitar grande ações de controle desnecessárias em caso de saturação da entrada.

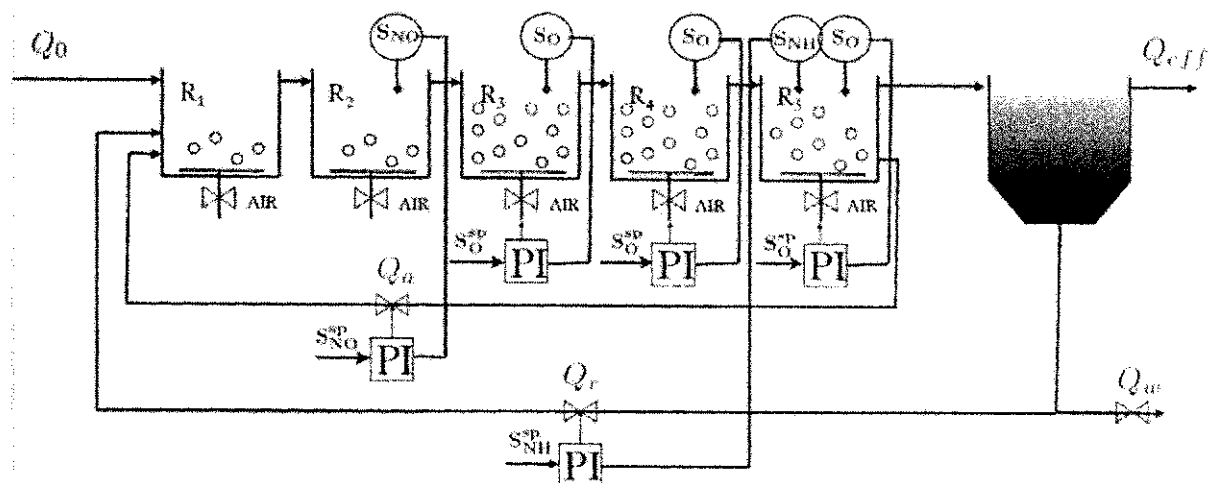


Figura 15: Configuração do controle baseado na análise da RGA

Tabela 7: Parâmetros de sintonia

Malha	“Setpoint”	$K_C$	$\tau_I$
$S_O^{(3)} \times K_L a^{(3)}$	$1.5 \text{ gO}_2/\text{m}^3$	$1000 \text{ m}^3 / (\text{gO}_2\text{d})$	0.003 d
$S_O^{(4)} \times K_L a^{(4)}$	$1.5 \text{ gO}_2/\text{m}^3$	$1000 \text{ m}^3 / (\text{gO}_2\text{d})$	0.003 d
$S_O^{(5)} \times K_L a^{(5)}$	$1.5 \text{ gO}_2/\text{m}^3$	$1000 \text{ m}^3 / (\text{gO}_2\text{d})$	0.003 d
$S_{NO}^{(2)} \times Q_a$	$1.0 \text{ gN}/\text{m}^3$	$3000 \text{ m}^6 / (\text{gNd})$	2.4 d
$S_{NH}^{(5)} \times Q_r$	$4.5 \text{ gN}/\text{m}^3$	$1500 \text{ m}^6 / (\text{gNd})$	2.4 d

A Figura 16 mostra as respostas das variáveis selecionadas ao aplicar os dados de tempo seco para a configuração de controle propostos sob condições nominais ótimas iniciais (apenas os últimos sete dias são relatados como sugerido por Alex et al.(2008)). Podemos facilmente ver as violações inaceitáveis na amônia do efluente e no nitrogênio total. Isto pode ser devido ao forte acoplamento com o controle perfeitamente ajustado do oxigênio e controle de nitrato, como previsto pelos resultados da análise de RGA.

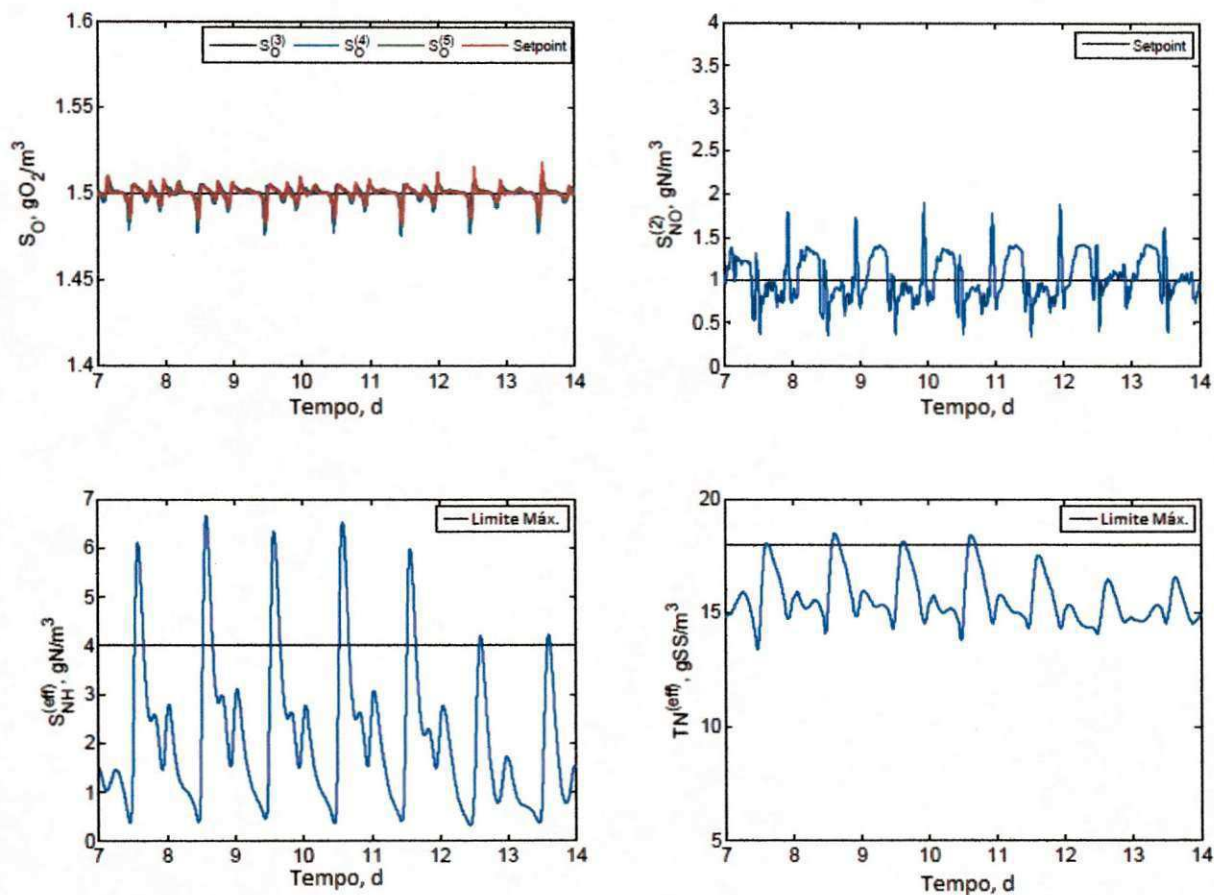


Figura 16: Respostas para malha fechada para o sistema no tempo seco sem ação do controle ‘feedforward’.

Uma maneira de contornar este problema é incluir uma ação “feedforward”. Um distúrbio que está sempre disponível, é a vazão de alimentação  $Q_0$ , e vamos usar isso para melhorar o controle de  $S_{NH}^{(5)}$ , e, portanto,  $TN^{(eff)}$ , fazendo a saída do controlador “feedforward” agir sobre  $Q_r$ . Uma razão de configuração suficientemente simples, e assumimos apenas um ganho de 5 sobre o desvio de vazão de alimentação, ou seja,  $Q_r / Q_0 = 5$ . Esta configuração de controle “feedforward / feedback” é mostrada na Figura 17.

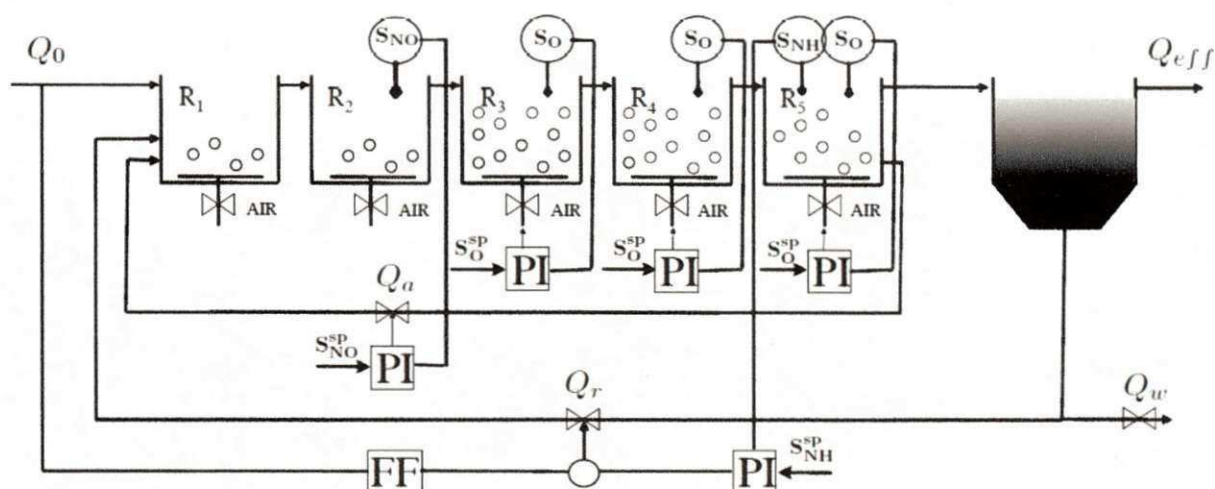


Figura 17: Configuração de controle com o controle “feedforward”.

A Figura 18 mostra os resultados para os dados de clima seco, onde podemos ver que a melhora é evidente, sem qualquer violação. As simulações também foram realizadas para os arquivos de tempo de chuva e tempestade, e os resultados também mostram nenhuma violação nas restrições de regulação (ver Figuras 19 e 20).

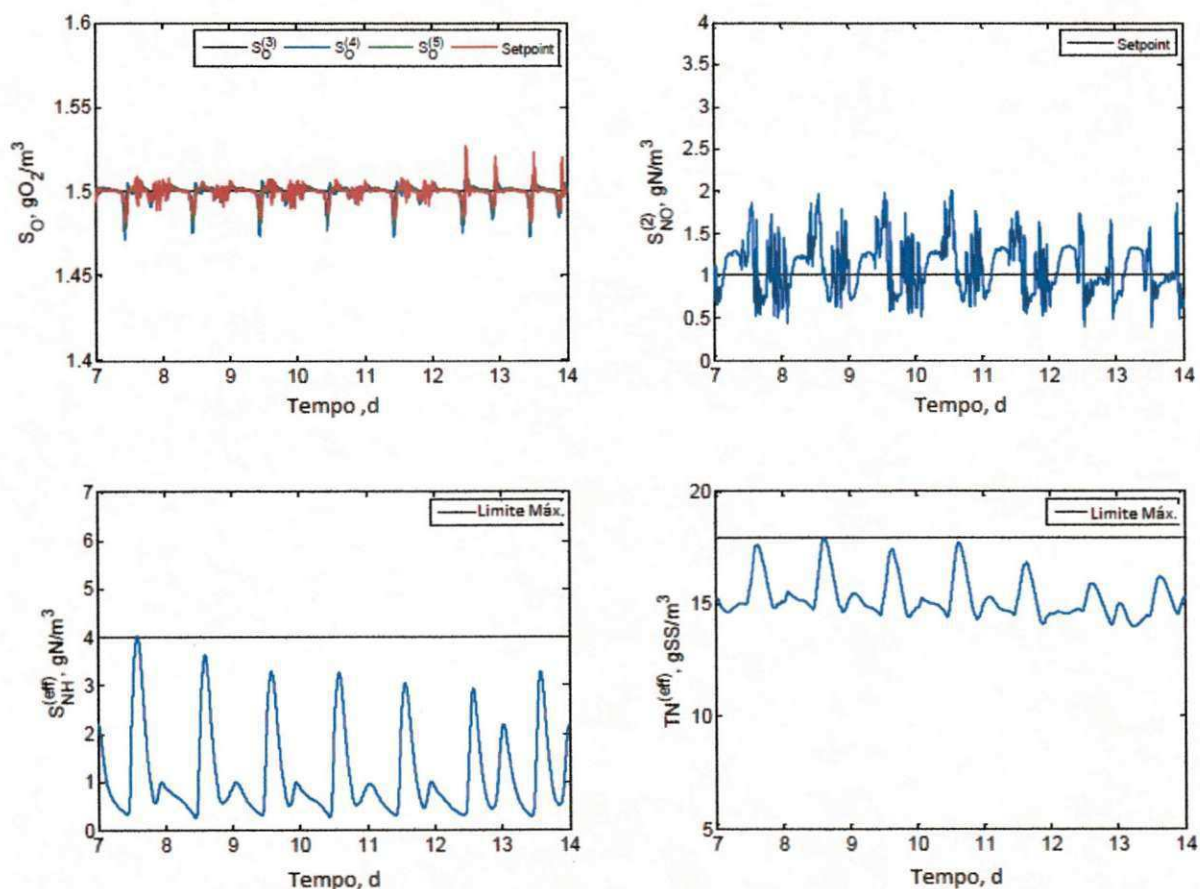


Figura 18: Respostas para malha fechada para o sistema no tempo seco com ação do controle “feedforward”.



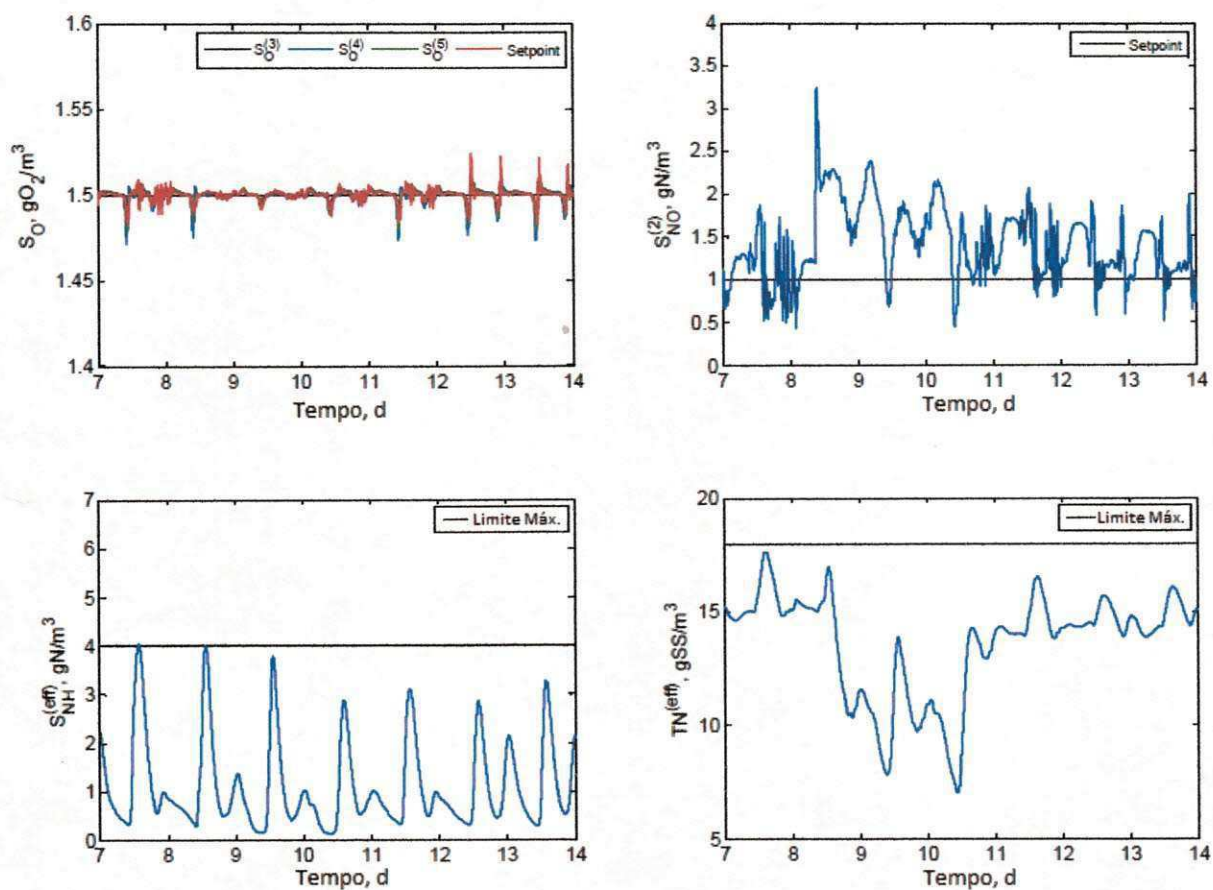


Figura 19: Respostas para malha fechada para o sistema no tempo de chuva com ação do controle “feedforward”.

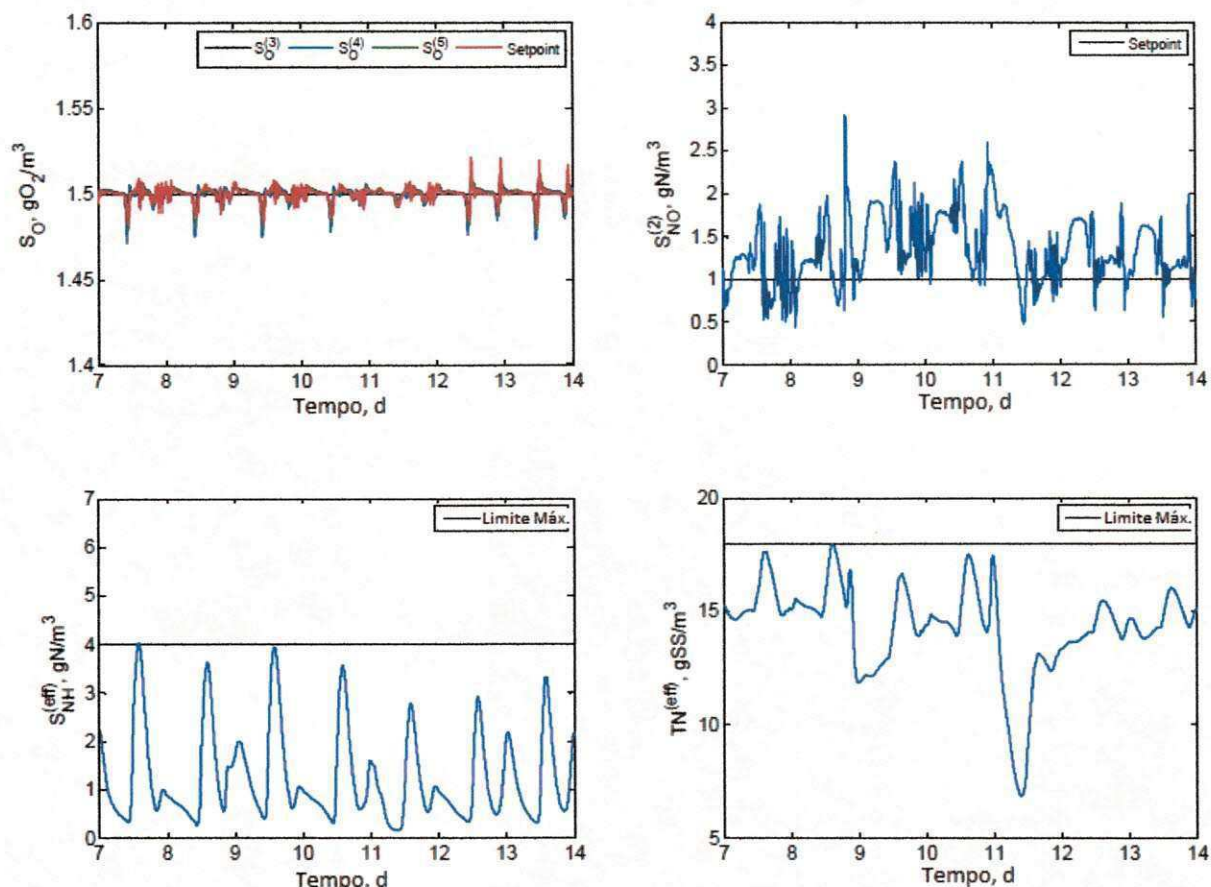


Figura 20: Respostas para malha fechada para o sistema no tempo de tempestade com ação do controle “feedforward”.

### 3.3 Discussões

Este trabalho centrou-se na aplicação de um procedimento “plantwide” para criar uma estrutura de controle para o sistema BSM1/ASM1 para o tratamento de águas residuais. O estudo foi baseado em uma análise do estado estacionário de um modelo não-linear, seguido por uma validação dinâmica da configuração de controle proposta, e a idéia era minimizar os custos operacionais para diferentes cenários de distúrbios, conforme listado na Tabela 5 com objetivo de atender as exigência de entrega de efluentes, dentro dos limites regulamentares apresentados na Tabela 4. No entanto, alguns aspectos da aplicação do referido procedimento para o ETE precisam ser abordados.

Os resultados das otimizações mostraram que é economicamente viável manter os níveis de oxigênio nas bacias aeróbicas no limite mínimo e de amônia no efluente, no limite máximo, a fim de economizar os custos de aeração. Além disso, o nitrato deve ser mantido em seu limite inferior, pois os custos com a disposição das lamas são reduzidos. Este fato é

bastante conhecido a partir de experiências empíricas, mas este trabalho mostra que é possível chegar a esse tipo de conclusão com uma análise sistemática. Com essas variáveis controladas em seus respectivos “setpoints” ótimos (controle das restrições ativas), a escolha teve que ser feita sobre a seleção do último grau de liberdade. Normalmente, esta última variável controlada deve ser selecionada através do cálculo das perdas derivativas quando é mantida constante em seu valor de “setpoint” nominal para um conjunto de distúrbios. No entanto, neste caso em particular, a escolha foi feita com base em fundamentos mais práticos, uma vez que é sempre desejável usar a manipulação mínima. Assim,  $Q_w$  foi escolhido como a variável controlada “irrestrita”, e as simulações mostraram bom desempenho dinâmico, isto é, sem violação das restrições de regulamentação. Além disso,  $Q_w$  só afeta o processo em uma maior escala de tempo maior do que da frequência ‘crossover’ do processo, pois influencia diretamente na idade do lodo e no inventário.

Outro aspecto a ser comentado é quanto à estratégia “feedforward” utilizada neste trabalho. Como controle das outras saídas é relativamente fácil de conseguir, optamos por utilizar um elemento “feedforward” para ajudar a manter a concentração da amônia no efluente abaixo de seu limite máximo permitido. Como resultado, o nitrogênio total também manteve-se abaixo do seu limite superior. No entanto, esta estratégia só foi possível porque a amônia no afluente e o fluxo na alimentação não estão defasados, como mostrado na Figura 21. Ou seja, um pico em  $S_{NH}^{(in)}$  corresponde a um pico em  $Q_0$ . Na verdade, deve-se medir  $S_{NH}^{(in)}$ , além de  $Q_0$  e usar  $Q_0 \cdot S_{NH}^{(in)}$  como a saída “feedforward”. No entanto, medir  $S_{NH}^{(in)}$  no efluente pode ser difícil e seja necessário introduzir outro dispositivo de medição no processo. Infelizmente, uma desvantagem desta abordagem é que ela provoca saturação de  $Q_r$  uma vez que, para que possa ser eficiente, se faz necessário alterar imediatamente a vazão de recirculação por um fator de 5, que corresponde, por exemplo a um  $\Delta Q_r$  de cerca de 30% a mais que o limite superior em  $Q_r$  quando  $\Delta Q_0$  aumenta por um fator de cerca de 2 para distúrbios como  $d_2$  e  $d_4$ . Alguns autores também relataram problemas de saturação na entrada, especialmente relacionados com a vazão de recirculação quando não há utilização de fonte externa de carbono. Portanto, o controle desse processo parece ser fundamentalmente difícil devido ao uso excessivo de entradas, e somente uma análise completa de controlabilidade, definitivamente poderia detectar se a planta é controlável.

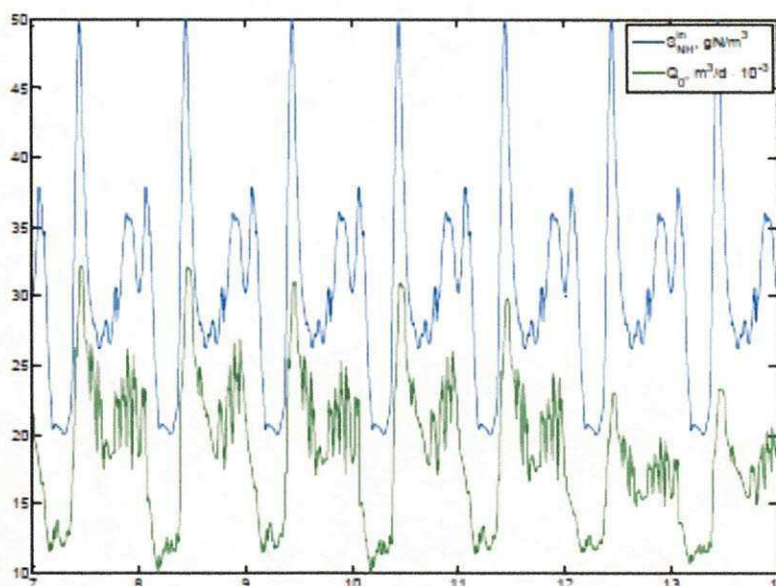


Figura 21: Distúrbios em  $Q_0$  e  $S_{NH}^{in}$  para tempo seco.

### 3.4 Conclusão

Este capítulo discutiu o projeto de uma estrutura de controle para um processo de tratamento de esgoto através da aplicação de um procedimento “plantwide”. A estrutura de controle resultante cumpre com êxito a tarefa de controlar a planta, mantendo as variáveis relacionadas nas restrições regulamentares dentro de seus limites e ao operar com o menor custo possível. Apesar de sua simplicidade, onde apenas um controlador “feedforward” está incluído, a configuração de controle final mostra bom desempenho transiente, rejeitando efetivamente os distúrbios típicos do processo.

## CAPÍTULO 4

Este capítulo é baseado no trabalho “*Sensitivity of Optimal Operation of an Activated Sludge Process Model*” publicado no anais do congresso : UKACC International Conference on Control 2012 em Cardiff, UK. Proceedings of The 2012 UKACC International Conference on Control. Red Hook, NY 12571 USA: Curran Associates, Inc., 2012. v. 1. p. 259-264 e no trabalho “*Sensitivity Analysis of Optimal Operation of an Activated Sludge Process Model for Economic Controlled Variable Selection*” na revista Industrial & Engineering Chemistry Research, v. 52(29), p. 9908-9921, 2013 (Anexo II).

### 4. Introdução

Do ponto de vista da modelagem, como já foi dito anteriormente o BSM1 original é baseado em dois modelos de processos amplamente aceitos: o Modelo de Lodo Ativado No.1 (ASM1) ( Henze *et al*, 1987) usado para modelar o processo biológico, e um modelo não-reativo de camada unidimensional para o processo de sedimentação baseado em Takacs (Takacs et al, 1991; Vitasovic, 1989).

Cada reator é modelado considerando uma mistura perfeita, com volume do tanque constante dentro do qual reações biológicas complexas dão origem a equações de balanço de massa de componentes, gerando um sistema de equações diferenciais ordinárias. O ASM1 é um modelo amplamente utilizado entre os ETE, e detalhes sobre as suas capacidades de reproduzir com fidelidade considerável o comportamento da seção de reação de um processo de lamas ativadas em efluentes podem ser encontrados numa vasta literatura.

Infelizmente, o mesmo grau elevado de reprodutibilidade não pode ser atribuído ao modelo matemático do sedimentador secundário, pois estas unidades exibem mecanismos muito complexos que ainda não são totalmente compreendidos (Plosz *et al*, 2011). No entanto, muito progresso tem sido feito para a construção de um modelo fisicamente sólido para o decantador secundário com base na teoria das equações diferenciais parciais aplicadas a lei de conservação com fluxos descontínuo (Diehl, 1996; Diehl e Jeppsson, 1998; Diehl, 2001; Diehl, 2008). Enquanto estes modelos matemáticos mais significativos que satisfazem fundamentais propriedades físicas (Burger *et al*, 2011) ainda não encontraram ampla aplicação em ETE, é comum recorrer a modelos aproximados do decantador, sendo o modelo de Takacs (Takacs *et al*, 1991; Vitasovic, 1989) a representação mais utilizada do decantador secundário em publicações de estudos e ambientes de software comerciais. Alguns autores

(Jeppsson e Diehl, 1996; Queinnec e Dochain, 2001; Verdickt e Van Impe, 2002) , no entanto, apontaram muitos contratempos relacionado com este modelo, entre os quais o fato de que o número de camadas de discretização não está de acordo com convergência numérica e sem formulação do modelo de distinção e solução numérica, mas em vez disso, é utilizado apenas como um parâmetro de modelo, a fim de corresponder as observações experimentais (David et al, 2009).

Na verdade, simulações numéricas têm mostrado (Burger *et al*, 2011) fracasso do modelo Takacs para representar o comportamento complexo de sedimentadores secundários, sob certas condições, e isso levou os pesquisadores a mudar para modelos significativamente mais confiáveis fisicamente.

Um desse modelos é descrito por Diehl (1996) que formula e analisa de forma dinâmica um modelo de sedimentador unidimensional que pode ser escrito por equações diferenciais parciais baseado na conservação de massa (lei da conservação).

Neste capítulo, um novo modelo de sedimentador secundário é proposto e juntamente com o modelo ASM<sub>1</sub> já discutido nos capítulos anteriores é realizada uma aplicação do controle Plantwide a uma planta de tratamento de Efluentes utilizando um procedimento de controle de tal forma que o funcionamento econômico ideal possa ser alcançado, respeitando as restrições de regulamentação para a descarga de efluentes. O método exato (linear) local e o método de espaço nulo estendido com base no conceito de controle com auto-otimização (“self-optimizing”) foram usados para sistematicamente selecionar as variáveis.

#### 4.1 Teoria do Fluxo de Sólidos

Quando o decantador é de operação contínua, o líquido no seu interior encontra-se em movimento. A operação de um decantador secundário num sistema de lodos ativados de fluxo contínuo inclui sempre a remoção, pelo fundo do sedimentador, do lodo sedimentado, que grande parte é retornado ao tanque de aeração pela vazão de recirculação ( $Q_r$ ) e outra descartada pela vazão de descarte ( $Q_w$ ). Então, é também essencial para a eficácia da decantação, que todo o lodo introduzido no decantador seja transferido ao seu fundo, pois de outra forma haverá acúmulo de lodo no seu interior e subsequente extravasamento de lodo pelo vertedor da unidade, juntamente com o efluente tratado. É necessário, portanto, que a taxa de transferência de sólidos em cada camada horizontal de lodo no interior do decantador seja pelo menos igual à taxa com que os sólidos a ele afluem (a taxa de aplicação de sólidos,

$T_S$ ) e, como consequência, que todo o lodo introduzido seja transportado ao fundo e dali removido.

A transferência dos sólidos introduzidos em um decantador de operação contínua para o fundo decorre de duas ações distintas. A primeira é a sedimentação propriamente dita, o movimento dos sólidos por ação da gravidade. A segunda é o arraste dos sólidos pelo líquido que se desloca para baixo em movimento determinado pela retirada do lodo do fundo, na operação de remoção de lodo ( $Q_u$ ) que pode ser representada por  $Q_u = Q_r + Q_w$ . A taxa de transferência dos sólidos para baixo é denominada fluxo de sólidos, o qual é definido como a massa de sólidos que atravessa a unidade de área de uma seção horizontal na unidade de tempo. De acordo com o que acaba de ser exposto, o fluxo de sólidos total  $J_T$  é a soma do fluxo de sólidos por gravidade  $J_s$  com o fluxo de sólidos por remoção  $J_B$ .

Considere-se uma seção horizontal qualquer de um decantador final de operação contínua que se situe entre o fundo da unidade e a interface líquido clarificado-lodo. Admita-se que em cada uma de todas as seções horizontais deste decantador a concentração de sólidos seja homogênea. Sejam  $X_i$  e  $v_i$ , respectivamente, a concentração de sólidos na seção considerada e a velocidade de sedimentação do lodo com esta concentração.

O fluxo de sólidos por gravidade através da seção analisada é:

$$J_{Si} = X_i v_i \quad (52)$$

O fluxo de sólidos por recirculação através da seção analisada, sendo  $U$  a velocidade descendente do líquido devida à remoção do lodo, é:

$$J_{Bi} = X_i U \quad (53)$$

E o fluxo de sólidos total corresponde a:

$$J_{Ti} = X_i v_i + X_i U \quad (54)$$

A equação (54) é geral e aplicável a cada uma das infinitas seções horizontais do decantador. Ela fornece o fluxo de sólidos total através de cada seção do decantador quando ele é operado tratando uma vazão  $Q_f$  de uma suspensão de um lodo específico, sob taxa de escoamento superficial  $T_S$  não superior à velocidade de sedimentação  $v_S$  do lodo com a

concentração de sólidos afluente  $X$ , sujeito a uma vazão de remoção  $Q_u$  tal que a razão entre  $Q_u$  e a área da superfície da unidade  $A$  seja igual a  $U$ .

Assim, ao longo da altura da manta de lodo de um decantador final existem infinitas camadas horizontais, nas quais as concentrações de sólidos vão variando, de cima para baixo, de  $X$  até  $X_u$ . Cada camada, com concentração  $X_i$ , tem uma capacidade de se deixar atravessar pelos sólidos expressa pela Equação (54). Como mostra aquela equação, este fluxo de sólidos máximo depende de  $X_i$  e da velocidade descendente do líquido  $U$ . Em última análise, depende de  $X_i$  e da vazão de remoção  $Q_u$ .

A partir do conhecimento dos valores de uma série de pares ordenados  $(X_i; v_i)$  característicos de um determinado lodo, calculam-se os respectivos fluxos de sólidos por gravidade  $J_{si}$ . Constrói-se, então, a curva *Fluxo de Sólidos por Gravidade X Concentração de Sólidos* do referido lodo representado na Figura 22.I.

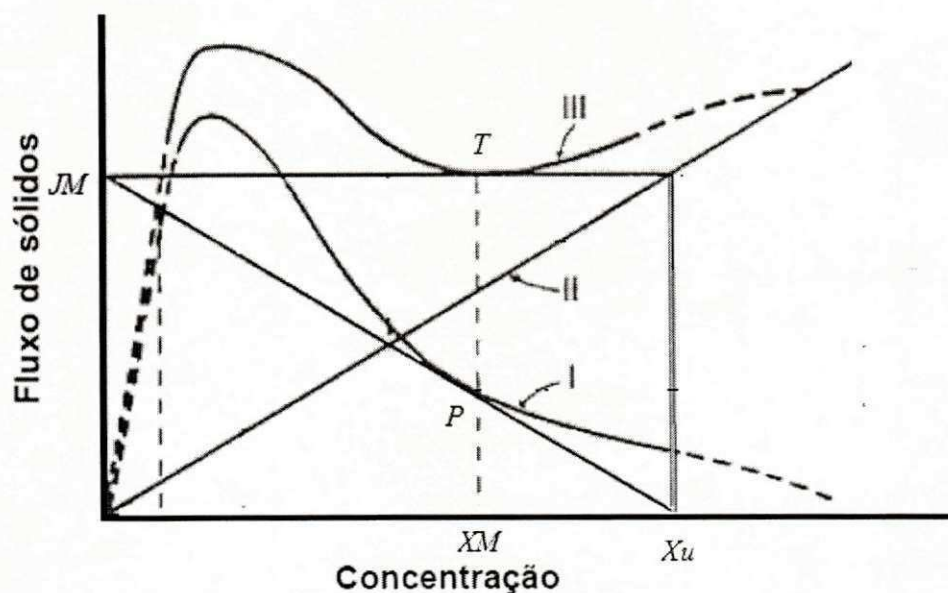


Figura 22: Curva de Fluxo de sólidos devido à sedimentação (I), devido à retirada de lodo (II) e fluxo total (III)

A análise do fluxo limitante ocorre por meio de gráfico de fluxo de sólidos, que é a somatória do fluxo devido à sedimentação e o fluxo devido à retirada pelo bombeamento do lodo adensado. A partir da concentração desejada no lodo adensado ( $X_u$ ), traça-se uma tangente à curva de fluxo de sedimentação até o ponto de fluxo máximo ( $J_M$ ), que corresponde ao fluxo possível de se processar em regime estável. O ponto tangente entre a curva de



sedimentação e a tangente a  $J_M$  será correspondente à concentração limitante  $X_M$ . O ponto mínimo de inflexão da curva de fluxo total será correspondente a  $J_M$ .

Uma observação atenta da Figura 22 mostra que quando o ponto de operação de um decantador final pertence à curva do fluxo de sólidos por gravidade, a unidade está sob carregamento de sólidos críticos.

Como ocorre com o ponto P, tomado como exemplo, a concentração de sólidos  $X$  na suspensão afluyente e a vazão de remoção  $Q_u$  são tais que a velocidade descendente do líquido determinada pela recirculação vale  $U_P$  e a concentração do lodo no seu fundo, requerida para que todo o lodo afluyente seja removido por  $Q_u$  alcança  $X_{UP}$ . Operando em tais circunstâncias, se estabelece uma camada horizontal entre o fundo e a interface líquido clarificado-lodo na qual a concentração de sólidos é  $X_P$  e o fluxo de sólidos total é  $J_{TP}$ , menor que todos os fluxos de sólidos de todas as demais camadas. Esta camada é, então, a camada limitante. Funcionando como se fora uma seção contraída do decantador, ela permite a passagem de um fluxo de sólidos total menor que o de qualquer outra seção. A existência desta camada limitante em uma posição acima da camada do fundo é facilmente visualizada na Figura 22 pelo ponto T.

A Figura 22 consiste no resultado da construção da curva dos fluxos de sólidos totais  $J_{Ti}$  para a velocidade descendente do líquido  $U_P$ , mediante a soma da curva dos fluxos de sólidos por gravidade  $J_{Si}$  com a reta dos fluxos de sólidos por remoção  $J_{Bi}$  relativa a  $U_P$ . Portanto, por sua própria natureza, esta curva resultante é o lugar geométrico dos pontos correspondentes aos fluxos de sólidos totais máximos.

Pode-se constatar que, quando aplicada uma vazão de remoção  $Q_u$  que origina uma velocidade descendente do líquido  $U_P$ , os fluxos de sólidos totais máximos do lodo estudado, nas diversas camadas horizontais do decantador, assumem valores tais que, na camada com concentração de sólidos  $X_P$  (ponto T da curva dos fluxos de sólidos totais, análogo do ponto P da curva dos fluxos de sólidos por gravidade) se estabelece o menor dos fluxos de sólidos totais máximos. Ela é, pois, a camada limitante deste lodo quando o decantador opera com  $U_P$ . Observa-se também que, operando o decantador com carregamento crítico, a sedimentação se dará, em seu interior, em regime permanente: ao longo do tempo as condições permanecem imutadas. Através da camada limitante, os sólidos são transferidos num fluxo que iguala o fluxo limite. Se o fluxo aplicado sofresse aumento, parte do lodo não conseguiria atravessar a camada limitante e se acumularia acima dela, fazendo com que sua espessura crescesse. A concentração da camada limitante ascenderia, ou seja, a concentração da camada limitante encontra-se no limiar de ascender.

Isto significa que a velocidade ascensional da concentração da camada limitante é igual em módulo à velocidade descendente do líquido devida à recirculação na sedimentação contínua.

## 4.2 Aplicação do Controle Plantwide a uma Planta de Tratamento de Efluente utilizando um modelo de sedimentador unidimensional baseado na lei da conservação de massa.

### 4.2.1 Descrição do processo

Neste capítulo para modelagem é utilizado também o modelo BSM1/ASM1 mantendo as características originais do processo nos tanques de atividade biológicas conforme já descrito no capítulo 2 e utilizando um modelo de sedimentador unidimensional baseado na lei da conservação de massa e na teoria de fluxo de sólidos.

A lei da conservação de massa pode ser usada para obter uma lei de conservação escalar não linear dada pela equação (55) (Diehl, 1996).

$$\frac{\partial X(z, t)}{\partial t} + \frac{\partial (F(X(z, t), z))}{\partial z} = s(t)\delta(z) \quad (55)$$

onde  $X$  é a concentração de sólidos floculada,  $\delta$  é a medida de Dirac,  $s$  é a fonte, e  $F$  é a função do fluxo, o qual é descontínuo em três pontos no espaço de coordenadas  $z$ , ou seja, na entrada e nas duas saídas representado na figura 23.

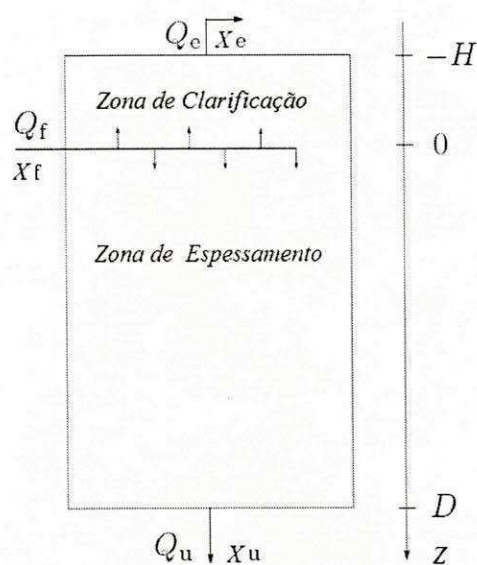


Figura 23: Esquema de um sedimentador clarificador-espessante, no qual  $X$  representa a concentração, e os três pontos na coordenada  $Z$ .

O foco principal está na sensibilidade do estado ótimo do decantador acoplado com a seção de reação biológica, e a solução do estado estacionário da equação (55) dadas por Diehl (2001) e Diehl (2008) que proporcionam a base para a análise. A Tabela 8 e a Figura 24, parcialmente reproduzem os resultados de Diehl (2001).

Tabela 8: Todos os estados estacionários do sedimentador (Diehl, 2001).

Regiões da Figura X	Excesso de Fluxo	$X_e$	$X_u$
$\mathcal{U}_1$	$\epsilon < 0$	0	$\frac{s}{q_u}$
$\mathcal{U}_2$	$\epsilon < 0$	0	$\frac{s}{q_u}$
$\ell_3$	$\epsilon < 0$	0	$\frac{f(X_M)}{q_u}$
$\ell_2$	$\epsilon = 0$	0	$\frac{f(X_M)}{q_u}$
$p$	$\epsilon = 0$	0	$\frac{f(X_M)}{q_u}$
$\ell_1$	$\epsilon = 0$	0	$\frac{f(X_f)}{q_u}$
$\ell_4$	$\epsilon = 0$	0	$\frac{f(X_f)}{q_u}$
$\mathcal{O}_1$	$\epsilon > 0$	$\frac{s - f(X_f)}{q_e}$	$\frac{f(X_f)}{q_u}$
$\ell_5$	$\epsilon > 0$	$\frac{s - f(X_M)}{q_e}$	$\frac{f(X_M)}{q_u}$
$\mathcal{O}_2$	$\epsilon > 0$	$\frac{s - f(X_M)}{q_e}$	$\frac{f(X_M)}{q_u}$
$\mathcal{O}_3$	$\epsilon > 0$	$\frac{s - f(X_f)}{q_e}$	$\frac{f(X_f)}{q_u}$

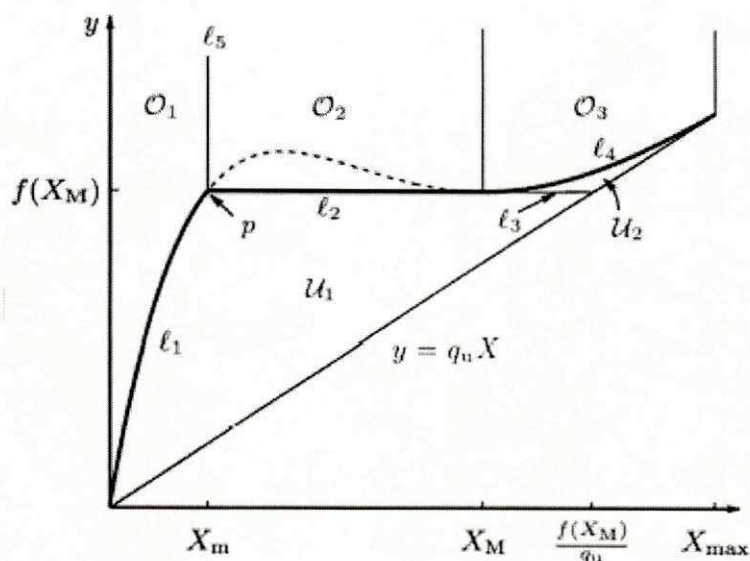


Figura 24: Gráfico do sedimentador no estado estacionário (Dieh, 2001).

O desenvolvimento apresentado a seguir se crê ser novo, uma vez que nenhuma referência correspondente tenha sido encontrada na literatura disponível.

Uma dada condição de alimentação, representado pelo par  $(X_f, s)$ , em que  $s = q_f X_f$ , com  $(q_f = Q_f/A)$  pode ser localizada em qualquer parte das 11 regiões relatadas na Tabela 8. A Figura 24 representa as regiões e descreve uma curva do fluxo geral na zona de espessamento (ou seja, abaixo do ponto de alimentação), o qual é dado pela equação  $f(X) = X v_s(X) + q_u X$ . Nesta expressão,  $v_s(X)$  é a velocidade de sedimentação aqui dada pelo dupla equação exponencial conforme a equação (26) do capítulo 2.

Como  $X_f$  e  $s$  são as variáveis de entrada para o decantador, que são primeiramente funções da atividade biológica na seção de reação, a taxa de fluxo através do fundo do decantador  $Q_u$  (ou  $q_u = Q_u/A$ ) é o único grau de liberdade (variável manipulada) no decantador, e pode ser utilizado como um variável de decisão para a otimização.  $Q_u$  é a soma das lamas que será reciclada ( $Q_r$ ) e a lama descartada ( $Q_w$ ), ou seja  $Q_u = Q_w + Q_r$ . Do ponto de vista de funcionamento economicamente ótimo, quanto menor  $Q_w$ , menor o custo com o tratamento do lodo descartado, e, conseqüentemente, menor o custo total. Como  $Q_r$  é principalmente uma função da atividade biológica na seção de reação, pode-se presumir que a minimização  $Q_u$  através de  $Q_w$  reduz o custo da operação de todo o sistema. Assim, para uma dada alimentação  $(X_f, s)$ , podemos portanto, concluir que o funcionamento ótimo do decantador fica na região sobrecarregada, até ao ponto em que qualquer uma das variáveis  $X_e$ ,  $DQO_e$ ,  $DBO5_e$  ou  $TN_e$  ( que são todos em função dos sólidos suspensos na zona de

clarificação) torna-se ativa, desde que o custo do tratamento de lodo seja positivo (uma vez que a digestão anaeróbia de lodo pode ser realmente lucrativo quando se considera que o biogás resultante pode ser comercializado).

A partir da Figura 24, a região sobrecarregada abrange quatro sub-regiões distintas. Em regiões  $\mathcal{O}_1$  e  $\mathcal{O}_5$ ,  $X_f$  é pequeno, o que pode não ser o caso de processos de lamas ativadas, devido à grande concentração de sólidos em suspensão, que é normalmente formada nos reatores biológicos. Em seguida, centraremos a análise sobre as regiões mais "concentradas"  $\mathcal{O}_2$  e  $\mathcal{O}_3$ , a fim de determinar as equações constitutivas do sedimentador a serem utilizadas para otimização. O excesso de fluxo  $\epsilon$  é definido na equação (56) (Dieh, 2008).

$$\epsilon(X_f, s) \equiv s - f_{min}(X_f) \quad (56)$$

onde o fluxo limite  $f_{min}(X)$  é dado pela equação (57) (Chancelier *et al*, 1994)

$$f_{min}(X) \equiv \min_{X < \alpha < X_{max}} f(\alpha) = \begin{cases} f(X_M), X \in (X_m, X_M) \\ f(X), X \in [X_M, X_{max}] \end{cases} \quad (57)$$

onde  $X_M$  é o mínimo de  $f(X)$ ;  $X_m$  é um valor estritamente menor que  $X_M$  satisfazendo  $f(X_m) = f(X_M)$ ; e  $X_{max}$  é a máxima concentração de sólidos em suspensão. Para as regiões  $\mathcal{O}_2$  e  $\mathcal{O}_3$  o excesso de fluxo  $\epsilon(X_f, s)$  é então dado por:

$$\epsilon(X_f, s) = \begin{cases} s - f(X_M), X_f \in (X_m, X_M) \\ s - f(X_f), X_f \in [X_M, X_{max}] \end{cases} \quad (58)$$

Na equação (59) é descrita a concentração de sólidos no efluente  $X_e$

$$X_e = \frac{\epsilon(X_f, s)}{q_e} = \frac{\epsilon(X_f, s)}{q_f - q_u} \rightarrow q_u = q_f - \frac{\epsilon(X_f, s)}{X_e} \quad (59)$$

Para a região  $\mathcal{O}_2$  aplica-se a equação (60)

$$q_u = q_f - \frac{s - f(X_M)}{X_e} \quad (60)$$

E tendo  $s = q_f X_f$  e  $f(X_M) = X_M v_s(X_M) + q_u X_M$  em (60), temos a equação (61)

$$q_u = \frac{X_e - X_f}{X_e - X_M} q_f + \frac{X_M}{X_e - X_M} v_s(X_M) \quad (61)$$

Analogamente para a região  $\mathcal{O}_3$ , com  $f(X_f) = X_f v_s(X_f) + q_u X_f$ , a equação (62) é encontrada.

$$q_u = q_f + \frac{X_f}{X_e - X_f} v_s(X_f) \quad (62)$$

Pode-se assumir que como  $X_f$  e  $X_M$  são grandes,  $X_f \gg X_e$  e também que  $X_M \gg X_e$  temos a equação (63).

$$q_u \cong \begin{cases} \frac{X_f}{X_M} q_f - v_s(X_M), X_f \in (X_m, X_M) \\ q_f - v_s(X_f), X_f \in [X_M, X_{max}] \end{cases} \quad (63)$$

Como o par  $(X_f, s)$  é primeiramente dependente da atividade biológica na seção de reação temos:

$$[q_f] X_f \in [X_M, X_{max}] > \left[ \frac{X_f}{X_M} q_f \right] X_f \in (X_m, X_M) \quad e \quad (64)$$

$$[v_s(X_f)] X_f \in [X_M, X_{max}] > [v_s(X_M)] X_f \in (X_m, X_M)$$

Por conseguinte, o menor valor de  $q_u$ , e, portanto, o custo mínimo com a disposição de lodo, é alcançada na região  $\mathcal{O}_2$  onde  $X_f \in (X_m, X_M)$ . Além disso, ter  $X_f \in (0, X_m)$  ou  $X_f \in (X_M, X_{max})$  depende da seção de reação ser capaz de produzir  $X_f$ , que pode não ser praticável. A região  $\mathcal{O}_2$  será o caso para o processo de lodos ativados considerado neste capítulo que será mostrado mais tarde na seção de otimização. No entanto, para cargas elevadas durante longos períodos de tempo, pode ser o caso onde  $X_f \in (X_M, X_{max})$ , teremos que mudar para a região  $\mathcal{O}_3$  onde  $q_u$  é maior.

Como consequência da análise anterior, o modelo em estado estacionário do decantador, utilizado para a otimização é dada por (65)

$$X_e = \frac{s - f(X_M)}{q_e}$$

$$X_u = \frac{f(X_M)}{q_u} \quad (65)$$

$$X_M = M(q_u)$$

$$X_f \in (X_m, X_M)$$

onde  $M$  é uma função que computa o mínimo local de  $f(X_M)$ . Além disso, também podemos calcular a concentração de sólidos em suspensão no estado estacionário na clarificação ( $X_{CL}$ ) e na zona de espessamento ( $X_{th}$ ) pela equação (66) (Dieh, 2001).

$$\begin{aligned} g(X_{cl}) + s &= f(X_M) \\ X_{th} &= X_M \end{aligned} \quad (66)$$

$$\text{onde } g(X_{cl}) = X_{cl}v_s(X_{cl}) - q_e X_{cl}$$

Nota-se que, embora neste trabalho considera-se o sedimentador não reativo, o oxigênio dissolvido no decantador é tratado de uma maneira especial (Diehl, 1998). Será assumido que o oxigênio é consumido dentro do sedimentador e, como consequência, a concentração de oxigênio nas saídas do sedimentador será definida como zero, que é de fato uma hipótese realista. Isso resulta em um cálculo mais conservador do oxigênio na seção de reação.

Neste trabalho, o BSM1 com o modelo de sedimentador secundário modificado proposto acima é reimplantado como um script de Matlab e utilizado o pacote ADMAT (Verma, 1998) para computar informações de primeira ordem baseada na diferenciação automática para otimização explícita.  $X_M$  é calculado implicitamente juntamente com as outras equações do modelo como a solução do  $\frac{df(X)}{dX} = 0$  com  $\frac{d^2f(X)}{dX^2} > 0$  como condição restrita para o mínimo.

#### 4.2.2 Descrição da Metodologia

Neste capítulo é utilizada a mesma metodologia descrita no capítulo 3 baseada principalmente nas primeiras 4 etapas, conhecidas como "análise top-down", do procedimento geral descrito por Skogestad (2004), onde a seleção da variável econômica é a questão chave. A análise realizada é de natureza local, ou seja, usamos modelos linearizados do processo

para desenvolver a metodologia. A seguir é dado maiores detalhes de cada etapa do procedimento da análise de sensibilidade.

#### 4.2.2.1 Definição do Objetivo operacional e determinação da operação ótima no estado estacionário:

Estas etapas são semelhantes às etapas apresentadas no capítulo 3 no item 3.1.1 e 3.1.2 respectivamente.

#### 4.2.2.2 Seleção das variáveis econômicas controladas (“primárias”)

Assim como no capítulo 3, a técnica de “self-optimizing control” é usada de forma que a idéia é selecionar um conjunto de variáveis ( $c$ ) que mantidas constantes nos seus respectivos valores ótimos (“set points” ótimos) levem a uma perda econômica aceitável quando a planta é submetida a distúrbios (Skogestad, 2000).

Uma maneira quantitativa para determinar o conjunto  $c$  é basear-se em uma aproximação quadrática da função de custo  $J$  (definido no problema de otimização sem restrições por  $\min_u J(u, d)$ ). Assim, pode ser demonstrado que a expansão exata de segunda ordem para função da perda é dada pela equação (67) a seguir.

$$L = \frac{1}{2} (u - u^{opt})^T J_{uu} (u - u^{opt}) = \frac{1}{2} z^T z = \frac{1}{2} \|z\|_2^2 \quad (67)$$

Com  $z = J_{uu}^{1/2} (u - u^{opt})$ , onde  $J_{uu} = \left(\frac{\partial^2 J}{\partial u^2}\right)$  é a hessiana de  $J$  sendo  $u$  avaliado em  $u_{opt}$ , no qual  $u_{opt}$  é o valor ótimo das variáveis manipuladas. Considera-se que  $c$  é expressa como uma combinação linear das medições disponíveis  $y$ , como na equação (68).

$$c = Hy \quad (68)$$

onde  $H$  é uma matriz real constante, a matriz dos coeficientes, e  $\dim(c) = \dim(u)$ .

Agora, supondo que temos um modelo (local) linearizado do processo em termos das variáveis de desvios dada pela equação (69)

$$y = \begin{bmatrix} G^y & G_d^y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ d \end{bmatrix} \quad (69)$$



Pode ser então mostrado (Alstad *et al*, 2009) que  $z$  pode ser expresso como uma função mais apropriada das variáveis de incerteza dado na equação (70)

$$z = [M_d \ M_{n^y}] \begin{bmatrix} d' \\ n^{y'} \end{bmatrix} \quad (70)$$

onde  $d'$  e  $n^{y'}$  são os distúrbios escalonados e o erro das variáveis de medição relacionadas por  $d = W_d d'$  e  $n^y = W_{n^y} n^{y'}$  ( $W_d$  e  $W_{n^y}$  são matrizes escalonadas), e  $M_d$  e  $M_{n^y}$  são dados pela equação (71) e (72) respectivamente:

$$M_d = -M_n H F W_d \quad (71)$$

$$M_{n^y} = -M_n H W_{n^y} \quad (72)$$

onde

$$M_n = J_{uu}^{1/2} (H G^y)^{-1} \quad (73)$$

e  $F = \frac{\partial y^{opt}}{\partial d}$  é a medida de sensibilidade ótima ( $y^{opt}$ ) em relação aos distúrbios, que pode ser encontrada explicitamente por (Alstad *et al*, 2009):

$$F = -(G^y J_{uu}^{-1} J_{ud} - G_d^y) \quad (74)$$

$$\text{com } J_{ud} = \left( \frac{\partial^2 J}{\partial u \partial d} \right)_{u^{opt}, d^{nom}}$$

Portanto, escolhe-se para calcular a perda pelo pior caso ( $L_{wc}$ ) para os distúrbios esperados e medidas dos ruídos por

$$L_{wc} = \max L = \frac{1}{2} \sigma^2 (M) \quad (75)$$

$$\left\| \begin{bmatrix} d' \\ n^{y'} \end{bmatrix} \right\| \leq 1$$

Em outras palavras, é necessário encontrar  $H$  que minimize  $\bar{\sigma}(M)$ , ou seja,  $H = \arg \min_H \bar{\sigma}(M)$ . Existem basicamente duas abordagens para resolver este problema de minimização.

A primeira resolve a minimização de uma só vez através da combinação de distúrbios e erros de medição, e, neste caso, uma fórmula explícita para  $H$  é dada pela equação (76) (Alstad *et al*, 2009).

$$H^T = ((\tilde{F}\tilde{F}^T)^{-1} G^y (G^{yT} (\tilde{F}\tilde{F}^T)^{-1} G^y)^{-1} J_{uu}^{1/2}) \quad (76)$$

onde  $\tilde{F} = [FW_d W_{n_y}]$  e  $\tilde{F}\tilde{F}^T$  deve ser com características plenas (“full rank”). Esta expressão aplica-se a qualquer número de medições  $n_y$ .

A segunda abordagem, chamada de método do espaço nulo estendido (Alstad *et al*, 2009), resolve o problema em primeiro lugar minimizando a perda em relação aos distúrbios, e, em seguida, se ainda existirem medições restantes suficientes, minimiza a perda em relação aos erros de medição. Uma das justificativas é que os distúrbios são a razão para a introdução de otimização e feedback em primeiro lugar. Outra razão é que pode ser mais fácil de reduzir erros de medições depois que se reduz os distúrbios. Pode-se mostrar que a expressão explícita para  $H$ , neste caso, é dada pela equação (77).

$$H = M_n^{-1} \tilde{J} (W_{n_y}^{-1} \tilde{G}^y)^\dagger W_{n_y}^{-1} \quad (77)$$

$$\text{onde } \tilde{J} = [J_{uu}^{1/2} \ J_{uu}^{1/2} \ J_{uu}^{-1} \ J_{ud}]$$

Existem 4 casos onde a equação (77) pode ser aplicada:

a) Medições suficientes são escolhidas, ou seja  $n_y = n_u + n_d$ . Neste caso  $H$  torna-se:

$$H = M_n^{-1} \tilde{J} (\tilde{G}^y)^{-1} \quad (78)$$

que é o mesmo de ter  $H$  no espaço nulo esquerdo de  $F$ , ou seja,  $H \in N(F^T)$ .

b) Medições extras também estão incluídas, ou seja,  $n_y > n_u + n_d$ , e deseja-se selecionar um subconjunto das medidas  $y$  tal que  $n_y = n_u + n_d$ . A solução é encontrar um subconjunto que maximize  $\sigma(\tilde{G}^y)$ , utilizando, por exemplo, um algoritmo do tipo Branch and Bound (Kariwala e Cao, 2009). O resultado de  $\tilde{G}^y$  é então usado para calcular  $H$  na equação (78).

c) Medições extras (usa-se todas as medições possíveis), ou seja,  $n_y > n_u + n_d$ .  $H$  é calculado usando a equação (77), onde  $\dagger$  denota a inversa esquerda, calculada como  $A^\dagger = (A^T A)^{-1} A^T$  para qualquer matriz  $A$  dada.

d) Poucas medições disponíveis, ou seja,  $n_y < n_u + n_d$ . neste caso, o  $H$  ótimo na equação (77) não é afetado pelo ruído e portanto torna-se:

$$H = M_n^{-1} \tilde{J} (\tilde{G}^y)^\dagger \quad (79)$$

onde  $\dagger$  denota a inversa direita, calculada como  $A^\dagger = A^T (A A^T)^{-1}$

O procedimento acima se resume em selecionar as candidatas a medições adequadas, ou seja, identificar  $n_y$  em relação a  $n_u + n_d$  e encontrar a combinação linear (matriz  $H$ ), ou um

subconjunto de medições, o qual resulta na menor perda entre todas as soluções possíveis. Um grande obstáculo a ser superado é o cálculo numérico da  $J_{uu}$  e  $J_{ud}$ . Para alguns problemas mal definidos, pode se tornar uma inviável tarefa, e uma solução é calcular  $F$  numericamente, já que  $F = \frac{\partial y^{opt}}{\partial d}$ . Felizmente, a fórmula geral do espaço nulo estendido descrito pela equação (77) pode, depois de alguma álgebra de matrizes, ser reformulada para a equação (80):

$$H = M_s (G^y)^{\dagger} [G^y (G_d^y - F)] (W_{n^y}^{-1} \tilde{G}^y)^{\dagger} W_{n^y}^{-1} \quad (80)$$

onde  $M_s = (J_{uu}^{-\frac{1}{2}} M_n)$  pode ser qualquer matriz não singular  $n_u \times n_u$ . Neste caso, seleciona-se  $M_n = J_{uu}^{\frac{1}{2}}$  de forma que a equação (76) e (77) são independentes da informação da hessiana.

### 4.2.3 Análise de Sensibilidade dos resultados

#### 4.2.3.1 Etapa 1: Objetivos Operacionais

A função objetivo global de custo a ser minimizada é a mesma dada pela equação (51) para fins no estado estacionário e sujeita a restrições de regulamentação do efluente (legislação) e algumas restrições do processo. Essas restrições estão listadas na tabela 9. A descrição detalhada desta etapa está no Capítulo 3 no item 3.2.1.

Tabela 9: Restrições do Processo

Restrições	Unidades	Definição
$0 \leq DQO^{(eff)} \leq 100$	$g \text{ DQO } /m^3$	Restrição de regulamentação
$0 \leq TSS^{(eff)} \leq 30$	$gSS/m^3$	Restrição de regulamentação
$0 \leq TN^{(eff)} \leq 18$	$gN/m^3$	Restrição de regulamentação
$0 \leq DBO_5^{(eff)} \leq 10$	$g \text{ DBO } /m^3$	Restrição de regulamentação
$0 \leq S_{NH}^{(eff)} \leq 4$	$gN/m^3$	Restrição de regulamentação
$Q_w \leq 1845$	$m^3/d$	Restrição de manipulação
$Q_r \leq 36892$	$m^3/d$	Restrição de manipulação
$Q_a \leq 92230$	$m^3/d$	Restrição de manipulação
$K_{La}^{(1-5)} \leq 360$	$d^{-1}$	Restrição de manipulação

Os valores das restrições do processo para os parâmetros de regulamentação ambientais ( $DQO$ ,  $TSS$ ,  $TN$ ,  $DBO_5$  e  $S_{NH}$ ) assim como os valores dos parâmetros de manipulação foram tomados a partir de Alex *et al.* (2008).

#### 4.2.3.2 Etapa 2: Operação Ótima em estado estacionário

Usando a informação apresentada na Tabela 3 do Capítulo 3 que fornece o número típico de graus de liberdade para algumas unidades de processo, em associação com o fluxograma de processo da Figura 3 apresentado no capítulo 2, existem 8 variáveis manipuladas (últimas quatro na Tabela 9), que correspondem a 8 graus de liberdade ( $u$ ) do estado estacionário. Os níveis de líquido no tanque de reator são considerados constantes no valor máximo capacidade devido ao esquema de transbordamento considerado para a planta.

Uma vez que a seleção das variáveis irrestritas é local (linear), os distúrbios escolhidos para este propósito são as entradas mais importantes no afluente (Alex *et al.*, 2008), que são a vazão de entrada  $Q_0$ , a demanda química de oxigênio  $DQO^{in}$ , a concentração total de sólidos em suspensão  $TSS^{in}$ , a concentração total de nitrogênio  $TN^{in}$  e a temperatura  $T$ . Obviamente, cada um destes distúrbios são considerados agindo sobre o processo um de cada vez.

Por outro lado, para avaliação da perda não-linear, deve-se definir cenários de distúrbios mais realistas. Neste capítulo também é considerado os dados de carga do afluente dado pela IWA Task Group no site de referência (<http://www.benchmarkwwtp.org>). Os três diferentes tempo / condições de afluentes são os mesmos considerados no capítulo 3, acrescido de uma quarta condição: o arquivo de longo prazo (Figura 25 (a, b)) que representa dados de 1,5 anos onde os primeiros 6 meses corresponde ao período de inverno e dados dos últimos 12 meses relacionados ao período de verão. As variações de temperatura durante este período de um ano também são consideradas.

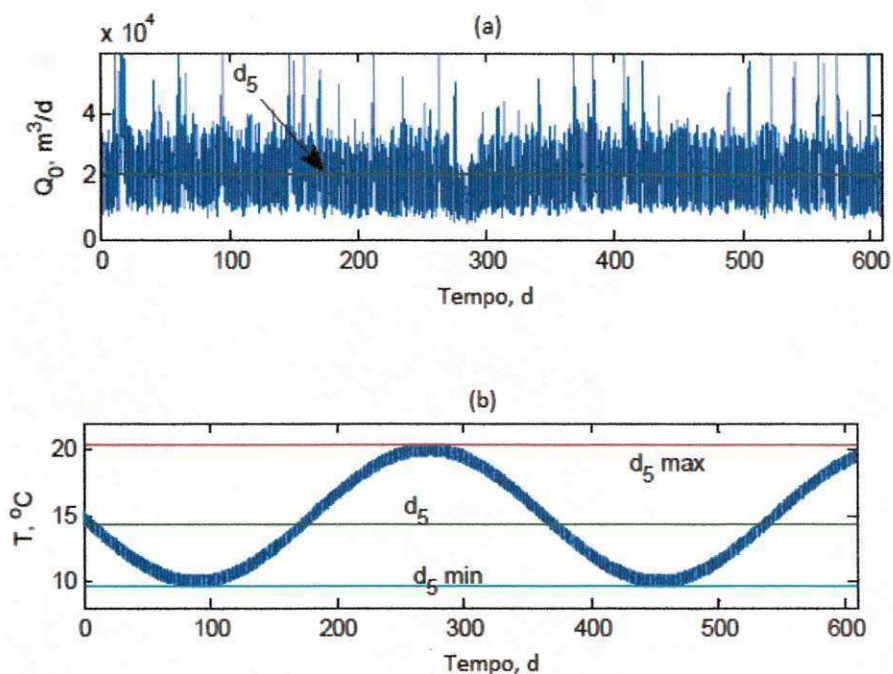


Figura 25: Vazão de efluente e variação de temperatura para o evento de longo prazo (Alex *et al.* (2008).

Na tabela 10 é apresentado os distúrbios usados para o calculo não linear em termos de vazão e carga de entrada do afluente para a condição de longo prazo. As variações de temperatura durante o período de um ano são relatadas e considera-se uma média ( $e_5$ ), um mínimo ( $e_{5,min}$ ) e um máximo ( $e_{5,max}$ ) para os valores da temperatura. Na verdade uma vantagem particular de se estudar esse processo é a disponibilidade dos perfis de eventos para diferentes condições climáticas (bem como os dados a longo prazo), porque ele definitivamente auxilia na análise de sensibilidade com os distúrbios reais para a planta. A importância deste tipo de discriminação é bem documentada em Gernaey *et al* (2006).

Tabela 10: Distúrbios do Processo

	$Q_0$	$DQO^{(in)}$	$TSS^{(in)}$	$TN^{(in)}$	$T$
	$[m^3/d]$	$[gDQO/m^3]$	$[gSS/m^3]$	$[gN/m^3]$	$[°C]$
$d_0$	18446	381	211	54	15
$d_5$	20850	347	199	41	15
$d_{5,min}$	20850	347	199	41	9
$d_{5,max}$	20850	347	199	41	21
Faixa Esperada					
$\text{Max}( d_o - d_{i,max} ,  d_o - d_{i,min} )$	22371	100	110	26	6

Para realizar a operação ótima do processo, seleciona as restrições ativas como variáveis a serem monitoradas (Maaevelde e Rijnsdorp, 1970). A questão mais difícil a ser considerada é de decidir quais das variáveis irrestritas serão selecionadas. Isto é resolvido recorrendo aos conceitos da seleção das variáveis primárias do processo descrito na seção anterior. O ponto de partida para a seleção das variáveis primárias (econômicas) é a otimização do processo. Para este fim, o modelo BSM1 mais o modelo proposto para o decantador secundário é reimplantado como um script em MatLab<sup>TM</sup> e a otimização nominal é realizada submetendo às restrições dadas na Tabela 9. A subrotina do MatLab "fmincon.m" é o otimizador escolhido, e afim de fazer a otimização ser executada de forma mais robusta, usa-se a diferenciação automática no Matlab (Verma, 1998) para calcular as informações de primeira ordem ou seja as Jacobianas e os gradientes.

#### 4.2.3.3 Etapa 3- Seleção das variáveis

Os resultados das otimizações podem ser vistos na Tabela 11, a qual fornece os valores de variáveis relevantes envolvida no processo. Três restrições são ativas, ou seja,  $TSS^{(eff)}$  (limite superior),  $S_{NH}^{(eff)}$  (limite superior) e  $Q_a$  (limite inferior). Como esperado,  $TSS^{(eff)}$  está em seu valor máximo para que  $Q_w$  seja pequeno. Em geral, a razão pela qual a variável  $S_{NH}^{(eff)}$  está ativa no seu limite superior é por que a nitrificação é um processo que demanda oxigênio e a eficiência de transferência de oxigênio do gás para líquido é relativamente baixa, de modo que apenas uma pequena quantidade de oxigênio fornecida é utilizada pelos microrganismos, a demanda de aeração (EA), a qual é a maior contribuinte no custo em uma estação de tratamento de águas residuais, é elevada. O fato de  $Q_a = 0$  é de algum modo surpreendente já que este em um sistema de pré desnitrificação é responsável pela manutenção de nitrato e matéria orgânica. Outro fato interessante é que o processo é otimamente operado aerobiamente, ou seja, sem a zona anaeróbica. A razão possível é devido à tentativa de minimizar os elevados custos com a aeração, e ao fato de que as restrições do nitrogênio total e amônia no efluente são facilmente alcançadas para as cargas de afluentes dadas. A otimização do processo de assumir a configuração original do modelo BSM1 onde os primeiros dois tanques são operados anaerobicamente, ou seja, com  $K_L a^{(1)} = K_L a^{(2)} = 0$ , também foi realizada (ver coluna denominada "original" na Tabela 11), o que resulta em um maior custo de operação.

Tabela 11: Efeito dos distúrbios nos valores ótimos das variáveis selecionadas no sistema.

Variável	Unidade	Nominal	Original	Status	Intervalo de medição	Ruído
<i>Custo</i>	$\$/d$	428.294	460.641	-	-	-
$E_P$	$\$/d$	17.365	20.278	-	-	-
$E_A$	$\$/d$	250.815	259.612	-	-	-
$E_M$	$\$/d$	0.000	21.600	-	-	-
$C_D$	$\$/d$	160.114	159.151	-	-	-
$S_O^{(1)}$	$gO_2/m^3$	0.118	0.000	Medida	0-10	0.250
$S_{NO}^{(1)}$	$gN/m^3$	1.410	0.207	Medida	0-20	0.500
$S_{NH}^{(1)}$	$gN/m^3$	14.920	16.117	Medida	0-50	1.250
$S_O^{(2)}$	$gO_2/m^3$	0.179	0.000	Medida	0-10	0.250
$S_{NO}^{(2)}$	$gN/m^3$	2.401	0.007	Medida	0-20	0.500
$S_{NH}^{(2)}$	$gN/m^3$	12.529	16.788	Medida	0-50	1.250
$S_O^{(3)}$	$gO_2/m^3$	0.152	0.288	Medida	0-10	0.250
$S_{NO}^{(3)}$	$gN/m^3$	3.388	2.482	Medida	0-20	0.500
$S_{NH}^{(3)}$	$gN/m^3$	9.642	11.683	Medida	0-50	1.250
$S_O^{(4)}$	$gO_2/m^3$	0.162	0.281	Medida	0-10	0.250
$S_{NO}^{(4)}$	$gN/m^3$	4.801	5.056	Medida	0-20	0.500
$S_{NH}^{(4)}$	$gN/m^3$	6.674	7.631	Medida	0-50	1.250
$S_O^{(5)}$	$gO_2/m^3$	0.162	0.291	Medida	0-10	0.250
$S_{NO}^{(5)}$	$gN/m^3$	6.154	7.676	Medida	0-20	0.500
$S_{NH}^{(5)}$	$gN/m^3$	4.000	4.000	-	-	-
$MLSS$	$gSS/m^3$	5856.478	5983.755	Medida	0-10000	250.000
$SRT$	$d$	13.828	14.196	-	-	-
$F/M$	$gDQO/gSS/d$	0.199	0.195	-	-	-
$DQO^{(eff)}$	$gDQO/m^3$	66.978	67.327	-	-	-
$TSS^{(eff)}$	$gSS/m^3$	30.000	30.000	-	-	-
$TN^{(eff)}$	$gN/m^3$	13.266	15.004	-	-	-
$DBO_5^{(eff)}$	$gDBO/m^3$	4.605	4.668	-	-	-
$S_{NH}^{(eff)}$	$gN/m^3$	4.000	4.000	-	-	-
$TSS^{(w)}$	$gSS/m^3$	10458.000	10238.000	Medida	0-10000	250.000
$S_{NO}^{(w)}$	$gN/m^3$	6.154	7.676	-	-	-
$Q_w$	$m^3/d$	191.375	194.316	Medida	0-100000	2500.000
$Q_r$	$m^3/d$	22921.983	25349.199	Medida	0-100000	2500.000
$Q_a$	$m^3/d$	0.000	3199.866	-	-	-

$Q_w/Q_0$	-	0.010	0.011	-	-	-
$Q_r/Q_0$	-	1.243	1.374	-	-	-
$K_{La}^{(1)}$	$d^1$	122.770	0.000	Medida	0-360	9.000
$K_{La}^{(2)}$	$d^1$	123.027	0.000	Medida	0-360	9.000
$K_{La}^{(3)}$	$d^1$	100.440	184.134	Medida	0-360	9.000
$K_{La}^{(4)}$	$d^1$	97.179	159.981	Medida	0-360	9.000
$K_{La}^{(5)}$	$d^1$	88.277	142.671	Medida	0-360	9.000
$Q_0$	$m^3/d$	18446.000	18446.000	Medida	0-100000	2500.000
$S_{NH}^{(in)}$	$gN/m^3$	31.560	31.560	Medida	0-50	1.250
$DQO^{(in)}$	$gDQO/m^3$	381.190	381.190	Medida	0-1000	25.000
$TSS^{(in)}$	$gSS/m^3$	211.268	211.268	Medida	0-10000	250.000
$TN^{(in)}$	$gN/m^3$	54.426	54.426	-	-	-
$T^{(in)}$	$^{\circ}C$	15.000	15.000	Medida	5-25	0.625

Vale ressaltar que uma vez que o decantador é modelado como um processo não-reativo, a concentração de amônia no efluente, pelo menos no estado estacionário, corresponde ao valor no último tanque aeróbio, e isto também se aplica a todos os outros componentes solúveis. Na prática, no entanto, há uma condição anóxica no decantador que favorece a desnitrificação responsável pela melhoria na redução de nitrogênio total de cerca de 15% quando em comparação com o modelo não-reativo assumido neste estudo (Gernaey *et al*, 2006).

Como essas três restrições ativas devem ser implementadas para garantir a ótima operação (Maarleveld e Rijnsdorp, 1970), ficamos com 5 graus de liberdade, e nós usamos os métodos locais descritos anteriormente para decidir pelo melhor conjunto de variáveis de controle irrestritas que atendam a técnica de “self-optimizing control” para satisfazer os graus de liberdade disponíveis. Consideramos as medidas indicadas na Tabela 11, que de acordo com Alex *et al* (2008) estão prontamente disponíveis para o processo. Além disso, o nível de ruído e o intervalo de medição para cada variável medida também são fornecidos (Alex *et al*, 2008), em que o ruído de medição corresponde a 0,25% do valor máximo do intervalo de medição. No geral, há  $n_y = 28$  medições,  $n_u = 5$  variáveis manipuladas,  $n_d = 5$  distúrbios, e como  $n_y > n_d + n_u$  pode-se esperar uma redução substancialmente na perda para os distúrbios e erros de medição.

Como existem muitas variáveis medidas, muitas manipuladas e vários distúrbios, podem-se computar várias matrizes  $H$ . O método considerado neste capítulo foi:



- 1- A combinação dos distúrbios e erros de medição utilizando todas as medidas disponíveis, onde  $H$  é calculado pela equação (76). Neste caso,  $H_1$  é uma matriz de combinação de  $5 \times 28$ ;
- 2- O método do espaço nulo estendido usando todas as medições, com  $H$  calculado pela equação (80). Neste caso,  $H_2$  também é uma combinação de matriz  $5 \times 28$ .
- 3- O método do espaço nulo estendido usando apenas medidas suficientes, onde  $\tilde{G}^y$  na equação (80) é encontrado por um algoritmo do tipo Brand and Bound (Kariwala e Cao, 2009). Neste caso,  $H_3$  é uma matriz de combinação  $5 \times 10$ .

Nota-se que aqui se normalizar a amplitude dos elementos em cada matriz  $H$  de tal modo que  $\|H\|_F = 1$ , onde  $\|\cdot\|_F$  é a norma de Frobenius.

*Observação 1:* As perdas calculadas pela equação (75) devem satisfazer o seguinte critério  $L_{wc}^{H_1} < L_{wc}^{H_2} < L_{wc}^{H_3}$  uma vez que uma das opções para  $H_1$  é utilizar apenas as medidas selecionadas por  $H_3$ , conseqüentemente  $L_{wc}^{H_1} < L_{wc}^{H_3}$ . Além disso,  $L_{wc}^{H_1} < L_{wc}^{H_2}$  por que o calculo de  $H_1$  incluem os distúrbios e os erros das medidas simultaneamente. Finalmente como  $H_2$  usa todas as variáveis medidas, o resultado da perda para  $H_3$  deve ser maior que  $H_2$ , ou seja,  $L_{wc}^{H_2} < L_{wc}^{H_3}$ .

*Observação 2 :* Escalonamento de  $H$  antes de calcular a perda. O escalonamento de  $H$  não altera a perda dada pela equação (75), com  $M_n$  calculado através da equação (73) com a informação de segunda ordem ( $J_{uu}$ ) disponível, visto que:

$$M = -J_{uu}^{1/2} \left( \frac{H}{\|H\|} G^y \right)^{-1} \frac{H}{\|H\|} [FW_d W_n^y] = -J_{uu}^{1/2} (HG^y)^{-1} H [FW_d W_n^y] = [M_d M_n^y] \quad (81)$$

As derivadas acima são de natureza local, uma vez que assumimos um modelo de processo linear e uma expansão da série de Taylor de segunda ordem para a função objetivo com entradas e distúrbios. Assim, as variáveis controladas são propostas apenas ótimas globalmente para o caso de um modelo linear e um objetivo quadrático. No entanto, neste estudo, para uma validação final, a sensibilidade da estrutura de controle proposta no estado estacionário através das perdas reais são verificadas utilizando o modelo não-linear do processo. A Tabela 12 mostra que as perdas são aproximadamente da mesma ordem de grandeza para todos os distúrbios dados.

Tabela 12: Calculo da perda não linear para os vários distúrbios

	Unidade	$d_1$	$d_2$	$d_3$	$d_4$	$d_5$	$d_{5,min}$	$d_{5,max}$
$Custo^{otimo}$	\$/d	426.783	490.086	420.555	599.359	419.829	491.283	357.955
$Custo^{H1}$	\$/d	427.088	507.184	420.615	602.525	420.361	494.371	inf
$Perda^{H1}$	%	0.072	3.489	0.014	0.528	0.127	0.629	inf
$Custo^{H2}$	\$/d	427.067	inf	420.601	inf	419.937	507.737	359.401
$Perda^{H2}$	%	0.067	inf	0.011	inf	0.026	3.349	0.404
$Custo^{H3}$	\$/d	426.970	495.860	420.597	608.948	420.368	492.817	358.711
$Perda^{H3}$	%	0.044	1.178	0.010	1.600	0.128	0.312	0.211

Observa-se também que a viabilidade nem sempre é garantida para todas as alternativas, e de fato a única alternativa onde  $H$  é calculado usando o método de espaço nulo estendido com apenas as medições suficientes é viável para todos os espectros de distúrbios. Neste caso particular, as variáveis escolhidas pelo algoritmo do tipo Brand and Bound que maximizou o valor mínimo singular de  $\tilde{G}^y$  foi  $[S_o^{(3)} S_o^{(4)} S_{NO}^{(4)} MLSS K_L a^{(1)} K_L a^{(2)} K_L a^{(3)} K_L a^{(4)} DQO^{(in)} T^{(in)}]$ , e suas respectivas combinações lineares são dadas a seguir:

$$C_1 = (0.59157)S_o^{(3)} + (-0.30503)S_o^{(4)} + (0.10780)S_{NO}^{(4)} + (-0.00036)MLSS + (-0.01598)K_L a^{(1)} + (0.00931)K_L a^{(2)} + (0.00951)K_L a^{(3)} + (0.00943)K_L a^{(4)} + (0.05261)DQO^{(in)} + (-0.22024)T^{(in)}$$

$$C_2 = (0.29348)S_o^{(3)} + (-0.05290)S_o^{(4)} + (0.26785)S_{NO}^{(4)} + (0.0016)MLSS + (0.00127)K_L a^{(1)} + (0.00358)K_L a^{(2)} + (0.00366)K_L a^{(3)} + (0.00368)K_L a^{(4)} + (-0.20926)DQO^{(in)} + (0.16069)T^{(in)}$$

$$C_3 = (-0.07428)S_o^{(3)} + (0.05747)S_o^{(4)} + (0.01442)S_{NO}^{(4)} + (0.00024)MLSS + (0.00008)K_L a^{(1)} + (0.00598)K_L a^{(2)} + (-0.00382)K_L a^{(3)} + (-0.00380)K_L a^{(4)} + (-0.02648)DQO^{(in)} + (0.06259)T^{(in)}$$

$$C_4 = (-0.28805)S_o^{(3)} + (0.10680)S_o^{(4)} + (-0.14808)S_{NO}^{(4)} + (-0.00041)MLSS + (0.00544)K_L a^{(1)} + (0.00754)K_L a^{(2)} + (0.00214)K_L a^{(3)} + (-0.00762)K_L a^{(4)} + (0.07352)DQO^{(in)} + (-0.01378)T^{(in)}$$

$$C_5 = (-0.29925)S_o^{(3)} + (0.10401)S_o^{(4)} + (-0.14870)S_{NO}^{(4)} + (-0.00042)MLSS + (-0.00550)K_L a^{(1)} + (-0.00802)K_L a^{(2)} + (-0.00812)K_L a^{(3)} + (0.00166)K_L a^{(4)} + (0.06965)DQO^{(in)} + (-0.00292)T^{(in)}$$

#### 4.2.3.4 Análise de Sensibilidade do custo em relação ao preço de energia e disposição

Assumindo um preço constante de energia  $K_E = 0.09$  \$/kWh e o preço de disposição do lodo de  $K_D = 80$  \$/ton, o custo total do sistema é de 428,294 \$/dia conforme pode ser visto na tabela 11. Com intuito de analisar a sensibilidade do custo ao preço da energia e disposição de lodo foram simulados valores para estas constantes de 2, 1,5 e 0,5 vezes o valor nominal do respectivo preço que podem ver visualizados nos gráficos 26 e 27. No gráfico 26 também

pode ser observado à disposição de lodo sendo contabilizada como uma receita, através da simulação mantendo o valor da constante de energia em seu valor nominal e aplicando preços negativos para a disposição de lodo.

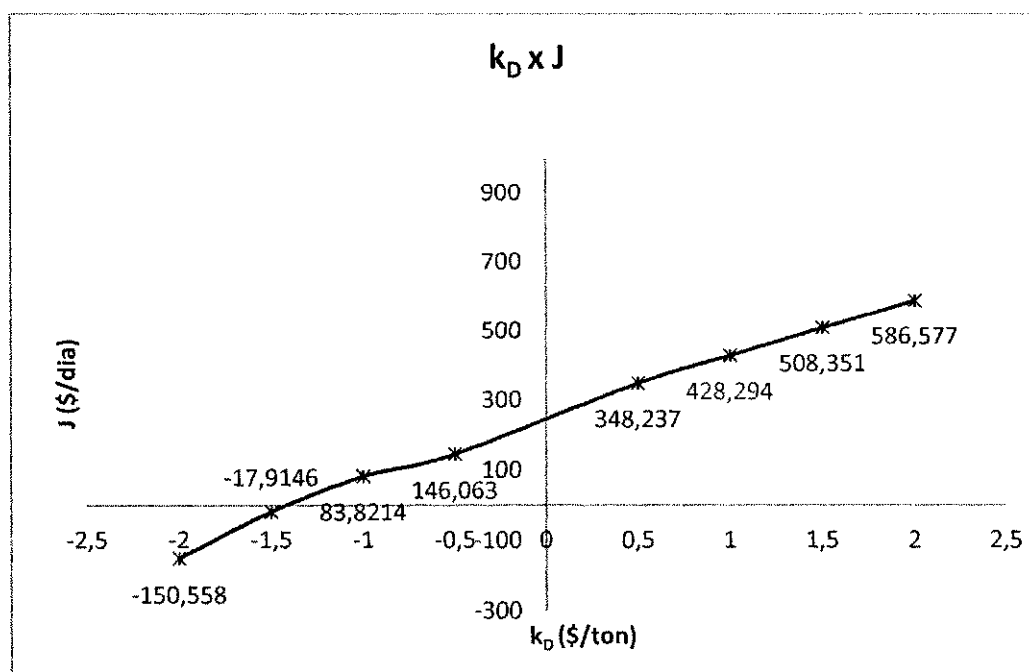


Figura 26: Análise de sensibilidade do custo  $J$  em relação ao preço de disposição  $K_D$ , considerando  $K_E$  no valor nominal

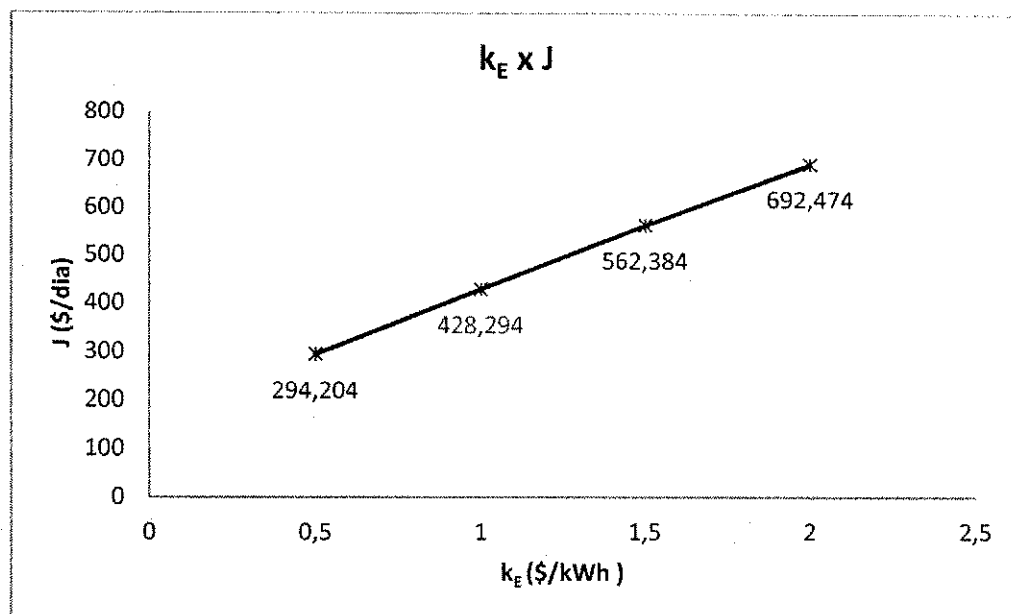


Figura 27: Análise de sensibilidade do custo em relação ao preço da energia  $K_E$ , considerando  $K_D$  no valor nominal.

Pode-se observar que um aumento em  $K_E$  é mais impactante que o mesmo aumento em  $K_D$ . Como exemplo, podemos verificar quando o preço significa 2 vezes mais o valor nominal o custo aumenta em 62% quando avaliado o preço da energia e 37% quando avaliado o preço da disposição de lodo. No gráfico 26 também é possível observar o ponto de equilíbrio de operação da estação de tratamento sendo este o local onde o custo  $J$  intersecta o zero no eixo das abcissas.

### 4.3 Discussão

Este capítulo teve como foco a aplicação de um processo de análise de sensibilidade para o modelo BSM1/ASM1, com um sedimentador unidimensional modelado com base na lei da conservação de massa e na teoria de fluxo descontínuo, ao invés do modelo de Takacs utilizado no Capítulo 3. Vale também ressaltar que esse capítulo também é baseado numa análise de estado estacionário de um modelo não-linear. A representação matemática resultante da operação do sedimentador no estado estacionário conduz a uma função mais suave que pode ajudar na convergência da rotina computacional utilizada para otimizar o modelo. O objetivo foi o de minimizar os custos operacionais para diferentes cenários de distúrbios, conforme listado nas Tabelas 5 e 10 e com objetivo de atender as exigências de entrega de efluentes, dentro dos limites regulamentares apresentados na Tabela 9.

Os resultados da otimização nominal mostrou que é economicamente viável manter os valores de sólidos em suspensão do efluente e as concentrações de amônia em seus respectivos limites superiores e que a recirculação interna das lamas não deve ser utilizada, pelo menos, quando é assumido a planta em estado estacionário. Quando o processo é operado dinamicamente,  $Q_a$  pode ser utilizado para controlar algumas variáveis internas, de modo a melhorar a capacidade de rejeição das perturbações do processo. Se estas variáveis são controladas em seus respectivos “setpoints” ótimos (controle das restrições ativas), uma escolha tinha que ser feita sobre a seleção dos 5 graus de liberdade restantes, e para isso foi utilizado a análise de sensibilidade com base em um procedimento *plantwide* para decidir sobre qual variável das 5 disponíveis seria usada para fixar / controlar os seus respectivos valores ótimos nominais. O método exato (linear) local e o método de espaço nulo estendido com base no conceito de controle com auto-otimização (“self-optimizing”) foram usados para sistematicamente selecionar as variáveis de tal forma que a tarefa de escolher e testar 5 de 28 possíveis combinações de variáveis, resultando em 98.280 estruturas de controle possíveis, é evitada. As combinações de matrizes  $H$  foram facilmente calculadas utilizando álgebra elementar de matrizes tal como descrito pelas fórmulas (76), (77) e (78). O maior esforço com esses cálculos reside no cálculo das matrizes ótimas  $J_{uu}$ ,  $J_{ud}$ , e  $F$ . Uma vez que a precisão das informações de segunda ordem encontradas numericamente podem ser difíceis de garantir, além de assegurar  $J_{uu}$  definitivamente positivo, o cálculo de  $F$  tornar-se mais atraente, e uma fórmula para a substituição da equação (77) foi obtida na equação (80).  $M_n$  nesta equação pode ser escolhido livremente, desde que seja uma matriz não-singular e optamos por  $M_n = J_{uu}^{1/2}$  de modo a evitar a necessidade de calcular  $J_{uu}$ . Além disso, uma vez que a solução de  $H$  em (76), não é única (Alstad *et al*, 2009), podemos também encontrar uma matriz não-singular  $nu \times nu$   $D$  tal que  $H_{new} = DH$  é ainda uma outra solução, e podemos escolher  $D$  como uma função de  $J_{uu}^{1/2}$ ; neste capítulo assumimos  $D = J_{uu}^{-1/2}$ .

#### 4.4 Conclusões

Este capítulo discutiu a aplicação de um procedimento de sensibilidade para uma operação ótima de uma estação de tratamento de efluente, utilizando um modelo de sedimentador unidimensional baseado na lei da conservação de massa e com a teoria de fluxo descontínuo. As variáveis  $S_{NH}^{eff}$ ,  $TSS^{eff}$  e  $Q_a$  foram mantidas como restrições ativas em seus valores ótimos e usando combinações lineares das medições como os cinco graus de liberdade irrestitos restantes foi possível garantir o funcionamento da planta próximo a operação ótima

com valores de perdas mínimas quando operando no modo nominal apesar dos severos distúrbios que afetam o processo.

## Conclusões Globais

Como contribuições deste trabalho podemos destacar:

- A aplicação de um método sistemático para definição de estruturas de controle em um *processo bastante complexo* como o processo de lodo ativado com resultados bastante satisfatórios principalmente em relação a custos assim como no controle operacional e especificações do efluente;
- A simplicidade da configuração de controle que mostrou bom desempenho, rejeitando efetivamente os distúrbios típicos do processo;
- A não utilização de uma fonte externa de carbono nos reatores anóxicos, prática essa bastante comum em artigos já citados;
- Uma adaptação do modelo de sedimentador já existente a uma situação prática.

## Trabalhos Futuros

- 1) Uma proposta seria a implementação do modelo BSM1/ASM1 modelando o sedimentador reativo, com objetivo de realizar um melhor ajuste entre o modelo de simulação e o real comportamento de uma planta de tratamento de efluente, já que segundo Koch *et al* (1999) 19% do nitrogênio é removido no decantador secundário. Para transformar o sedimentador em uma unidade reativa, cada camada será considerada como um reator bem misturado, do ponto de vista dos componentes solúveis e insolúveis. As reações biológicas do modelo ASM1 estarão ocorrendo em cada camada.
- 2) Realizar a implantação destes resultados em uma aplicação de escala industrial.
- 3) Outra proposta seria avaliar o sistema de desnitrificação realizando a adição de uma fonte externa de carbono, verificando e comparando os resultados na remoção de nitrogênio total, realizando a dosagem de carbono em diferentes locais da planta como por exemplo nos tanques anóxicos e nos ciclos externo e interno.
- 4) Tendo por base as informações/ resultados do capítulo 3, realizar um estudo no qual implementaria a estratégia de “back-off” para encontrar os pontos de ajuste sub-ótimos que leva à viabilidade das restrições de regulamentação (em especial sobre  $S_{NH}^{eff}$  e  $TN^{eff}$ ).
- 5) Realizar a implementação do filtro de Kalman para sistemas não lineares, capaz de estimar as variáveis de estado.

## Referências Bibliográficas

Alex, J. ; Beteau, J. F. ; Copp, J. B. ; Hellinga, C.; Jeppsson, U.; Marsili-Libelli, S.; Pons, M. N. ; Spanjers, H. and Vanhooren, H.. Benchmark for evaluating control strategies in wastewater treatment plants. In *European Control Conference (ECC'99)*, page BM10, Karlsruhe, Germany, 1999.

Alex, J.; Benedetti, L.; Copp, J.; Gernaey, K. V. ; Jeppsson, U.; Nopens, I.; Pons, M. N. ; Rieger, L.; Rosen, C. ; Steyer, J. P. ; Vanrolleghem, P. and Winkler, S.. Benchmark simulation model no. 1 (bsm1). Technical report, Dept. of Industrial Electrical Engineering and Automation - Lund University, Sweden, 2008.

Alstad, V., Skogestad, S., and Hori, E. S. Optimal measurement combinations as controlled variables. *Journal of Process Control*, pages 138–148, 2009.

Ayesa, E.; Goya, B.; Larrea, A.; Larrea, L. and Rivas, A.. Selection of operational strategies inactivated sludge processes based on optimization algorithms. *Wat. Sci. Tech.*, 37(2):327–334, 1998.

Biegler, L. T.; Cuthrell, J. E. Improved infeasible path optimization for sequential modular simulators—II: The optimization algorithm. *Comput. Chem. Eng.*, 9 (3), 257–267, 1985.

Braatz, R. D. and Morari, M.. Minimizing the euclidean condition number. *SIAM J. Control and Optimization*, 32(6):1763–1768, 1994.

Buckley, P. S.. *Techniques of process control*. John Wiley and Sons. New York, USA, 1964.

P. Samuelsson, B. Halvarsson, and B. Carlsson. Cost-efficient operation of a denitrifying activated sludge process. *Water Research*, 41:2325–2332, 2007.

Burger, R., Diehl, S., and Nopens, I. A consistent modelling methodology for secondary settling tanks in wastewater treatment. *Water Research*, 45:2247–2260, 2011.



Copp, J. B. The cost simulation benchmark - description and simulator manual. Technical report, Office for official publications of the European Communities, Luxembourg, 2002.

Cadet, C.; Beteau J. F., and Hernandez, S. C.. Multicriteria control strategy for cost/quality compromise in wastewater treatment plants. *Control Engineering Practice*, 12:335–347, 2004.

Carlsson, B. and Rehnstrom, A.. Control of an activated sludge process with nitrogen removal – a benchmark study. *Wat. Sci. Tech.*, 45(4-5):135–142, 2002.

Chachuat, B.; Roche, N.; and Latifi, M. A. Dynamic optimisation of small size wastewater treatment plants including nitrification and denitrification processes. *Comp. Chem. Engrn.*, 25:585–593, 2001.

Chancelier, J. P., Cohen de Lara, M., and Pacard, F. Analysis of a conservation pde with discontinuous flux - a model of settler. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 54(4):954–995, 1994.

David, R., Vassel, J. L., and Vande Wouwer, A. Settler dynamic modeling and matlab simulation of the activated sludge process. *Chemical Engineering Journal*, 146:174–183, 2009.

Diehl, S. A conservation law with point source and discontinuous flux function modelling continuous sedimentation. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 56(2):388–419, 1996.

Diehl, S. and Jeppsson, U. A model of the settler coupled to the biological reactor. *Water Research*, 32(2):331–342, 1998.

Diehl, S. Operating charts for continuous sedimentation I - control of steady states. *Journal of Engineering Mathematics*, 41:117–144, 2001.

Diehl, S. The solids-flux theory confirmation and extension by using partial differential equations. *Water Research*, 42:4976–4988, 2008.

Diehl, S.. Operating charts for continuous sedimentation II: Step responses. *Journal of Engineering Mathematics*.53(2):139-185, 2005.

Garcia-Sanz, M.; Eguinoa, I.; Gil-Martinez, M. ; Irizar, I. and Ayesa, E.. Mimo quantitative robust control of a wastewater treatment plant for biological removal of nitrogen and phosphorus. In *16<sup>th</sup> Mediterranean Conference on Control and Automation*, pages 541–546, Ajaccio, France, 2008.

Gernaey, K. V. ; Jeppsson, U.; Batstone, D. J. and Ingildsen, P.. Impact of reative settler models on simulated wwtp performance. *Wat. Sci. Technol.*, 53(1):159–167, 2006.

Gernaey, K. V., Rosen, C., and Jeppsson, U. Wwtp dynamic disturbance modelling - an essential module for long-term benchmarking development. *Wat. Sci. Technol.*, 53(4-5):255–234, 2006.

Henze, M.; Grady, L. C. P. ; Gujer, W.; Maris, G. V. R. and Matsuo, T.. Activated sludge model no.1 (asm1). Scientific and technical report no. 1, IAWQ, London, UK, 1987.

Higbie, R.. *The rate of absorption of a pure gas into a still liquid during short periods of exposure*. Journal of American Inst. Chem. Engineers Trans, vol. 31, p. 365-390, 1935.

IBGE – Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística. Municípios com coleta e com tratamento de esgoto, segundo as Grandes Regiões e as Unidades da Federação – 2008 ; Pesquisa Nacional de Saneamento Básico.

[http://www.ibge.gov.br/home/estatistica/populacao/condicaodevida/pnsb2008/tabelas\\_df/tab054.pdf](http://www.ibge.gov.br/home/estatistica/populacao/condicaodevida/pnsb2008/tabelas_df/tab054.pdf), último acesso 08 de março 2011.

Ingildsen, P.; Olsson, G. and Yuan Z. A hedging point strategy - balancing effluent quality, economy and robustness in the control of wastewater treatment plants. *Wat. Sci. Tech.*, 45(4-5):317–324, 2002.

Jeppsson, U. “A General Description of the IAWQ Activated Sludge Model No. 1”, IEA, Lund, Sweden, 1997

Jeppsson, U. and Diehl, S. An evaluation of a dynamic model of the secondary clarifier. *Water Science and Technology*, 34(5/6):19–26, 1996.

Kariwala, V. and Cao, Y. Bidirectional branch and bound for controlled variable selection. part ii: Exact local method for self-optimizing control. *Computers and Chemical Engineering*, 33(8):1402–1412, 2009.

Khudenko, B.M., Shpirt, E. *Hydrodynamic parameters of diffused air systems*. Water Research, v 20, n 7, pp 905-915, 1986.

Koch, G.; Pianta, R.; Krebs, P. and Siegrist, H. Potential of denitrification and solids removal in the rectangular clarifier. *Wat. Res.*, 33(2), 309–318, 1999.

Lara, J. M. V. Identificação de Modelos para Controle Preditivo: Aplicação a uma Planta de Lodos Ativados. Tese (Doutorado em Engenharia Elétrica)- Universidade Estadual de Campinas- UNICAMP, Campinas, 2005.

Larsson, T.; Skogestad, S. “Plantwide control – A review and a new design procedure”, *Model., Identif. Control*”, v. 21, n. 4, pp. 209-240, 2000.

Lewis, W. K.; Whitman, W.G. *Principles of gas absorption*. Industrial and Engineering Chemistry. v.16, n.12, p. 825-833, 1924.

Lid, T. and Skogestad, S.. Scaled steady state models for effective on-line applications. *Computers and Chemical Engineering*, 32:990–999, 2008.

Londong, J. Strategies for optimized nitrate reduction with primary denitrification. *Wat. Sci. Tech.*, 26(5-6):1087–1096, 1992.

Luyben, W. L. ; Tyréus, B. D. ; Luyben, M. L.. *Plantwide process control*. McGraw-Hill. USA, 1998.

Ma, Y.; Peng, Y. and Wang, S.. New automatic strategies for sludge recycling and wastage for the optimum operation of predenitrification processes. *J. Chem. Technol. Biotechnol.*, 81:41-47, 2006.

Maarleveld, A.; Rijnsdorp, J. E. . Constraint control on distillation columns. *Automatica* 6, 51-58, 1970.

Machado, V. C.; Gabriel, D.; Lafuente, J. and Baeza, J. A.. Cost and effluent quality controllers design based on the relative gain array for a nutrient removal wwtp. *Water Research*, 43:5129-5141, 2009.

Metcalf and Eddy Inc. *Wastewater engineering - treatment and reuse*. McGraw-Hill, New York, USA, 4th edition, 2003.

Mulas, M.. "Modelling and Control of Activated Sludge Processes" 159 f. Tese (Doutorado em Engenharia Industrial)- Universit`a degli Studi di Cagliari, Cagliari, It`alia, 2006.

Nielsen, M. K. Control of wastewater systems in practice. In *Instrumentation Control and Automation, Conference*, page IWA 1, Malmö, Sweden, 2001.

Nocedal, J.; Wright, S. J. *Numerical Optimization*; Springer Series in Operations Research; Springer: New York, 1999

Olsson, G.; Nielsen, M. K. ; Yuan, Z.; Lynggaard-Jensen, A. and Steyer, J. P.. *Instrumentation, Control and Automation in Wastewater Systems*. IWA Publishing, London, UK, 2005.

Olsson, G.; Newell, B.. *Wastewater Treatment Systems*. IWA Publishing, London, UK, 1st edition, 1999.

Painmanakul, P.; Wachirasak, J.; Jamnongwong, M.; Hébrard, G. Theoretical Prediction of Volumetric Mass Transfer Coefficient ( $K_L a$ ) for designing an Aeration Tank. *Engineering Journal*, Vol 13, 2009

Plosz, B. G., Nopens, I., DeClerq, J., Benedetti, L., and Vanrolleghem, P. A. Shall we upgrade

one-dimensional secondary settler models used in wwtp simulators? an assessment of model structure uncertainty and its propagation. *Water Science and Technology*, 63(8):1726–1738, 2011.

Price, R.M. ; Lyman, P. R. ; Georgakis, C.. Throughput manipulation in plantwide control structures. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 33, 1197–1207,1994.

Queinnec, D. and Dochain, D. Modelling and simulation of the steady-state of secondary settlers in wastewater treatment plants. *Water Science and Technology*, 43(7):39–46, 2001

Ramalho;R.S. *Introduction to Wastewater Treatment Processes*. Laval University, Quebec-Canada, 2th edition, 1983.

Rivas, A., Irizar,I. and Ayesa, E.. Model-based optimisation of wastewater treatment plants design. *Environ. Model. Softw.*, 23:435–450, 2008.

Roma, M. Dynamic scaling based preconditioning for truncated newton methods in large scale unconstrained optimization. *Optim. Methods Software*, 20 (6), 693–713, 2005.

Serralta, J.; Ribes, J.; Seco, A. and Ferrer, J. A supervisory system for optimising nitrogen removal and aeration energy consumption in wastewater treatment plants. *Wat. Sci. Tech.*, 45(4-5):309– 316, 2002.

Shena, W. ; Chena, X. and Corriou, J. P.. Application of model predictive control to the bsm1 benchmark of wastewater treatment process. *Computers and Chemical Engineering*, 32:2849–2856, 2008.

Shena, W. ; Chena, X., Ponsb, M. N. and Corriou, J. P.. Model predictive control for wastewater treatment process with feedforward compensation. *Chemical Engineering Journal*, 155:161 174, 2009.

Shiau, C.C.*Oxygen transfer in bubble and bubbleless aeration systems*, Ph D. thesis, University of Wollongong, Department of civil and Mining Engineering, 1995.

Skogestad, S.; Postlethwaite, I. *Multivariable Feedback Control: Analysis and Design*. John Wiley & Sons. Chichester, UK, 2005.

Skogestad, S.. Near-optimal operation by self-optimizing control: from process control to marathon running and business systems. *Computers and Chemical Engineering* **29**(1), 127–137, 2004b.

Skogestad, S.. Control structure design for complete chemical plants. *Computers and Chemical Engineering*, 28:219–234, 2004.

Skogestad, S.. Plantwide control: Towards a systematic procedure. In: *Proceedings of the European Symposium on Computer Aided Process Engineering 12*. pp. 57–69, 2002.

Skogestad, S.. Plantwide control: The search for the self-optimizing control structure. *Journal of Process Control* **10**, 487–507, 2000.

Stare, A.; Vrecko, D.; Hvala, S.; and Strmcnik, S. Comparison of control strategies for nitrogen removal in an activated sludge process in terms of operating costs: a simulation study. *Water Research*, 41:2004–2014, 2007.

Stephanopoulos, G.; Ng, C. “Perspectives on the synthesis of plant-wide control structures”, *Journal of Process Control*, v.10, pp. 97-111, 2000.

Takacs, I.; Patry, G. G. and Nolasco, D.. A dynamic model of the clarification-thickening process. *Water Research*, 25(10):1263–1271, 1991.

Verdictt, L. B. and Van Impe, J. F. Simulation analysis of a one-dimensional sedimentation model. In *Preprints of the 15th triennial IFAC World Congress (CDROM)*, page 6, Barcelona, Spain, 2002.

Verma, A. Admat: Automatic differentiation in matlab using object oriented methods. In *SIAM Interdisciplinary Workshop on Object Oriented Methods for Interoperability*, pages 174–183, Yorktown Heights, New York, USA, 1998. SIAM, National Science Foundation.

Vitasovic, Z. Z. Continuous settler operation: A dynamic model. In *Dynamic Modeling and Expert Systems in Wastewater Engineering*, pages 59–81, Lewis, Chelsea, Michigan, USA, 1989.

Vrecko, D.; Hvala, N.; and Carlsson, B.. Feedforward-feedback control of an activated sludge process: a simulation study. *Wat. Sci. Tech.*, 47(12):19–26, 2003.

Vrecko, D.; Hvala, N.; and Kocijan, J.. Wastewater treatment benchmark: what can be achieved with simple control. *Wat. Sci. Tech.*, 45(4-5):127–134, 2002.

Von Sperling, M. Princípios do Tratamento Biológico de Águas Residuárias: Lodos Ativados, Vol. 4, 2a edn, Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brasil, 2000

Wahab, N. A. ; Katebi, R. and Balderud, J.. Multivariable pid control design for activated sludge process with nitrification and denitrification. *Biochemical Engineering Journal*, 45:239–248, 2009.

Yong, M. ; Yongzhen, P. and Jeppsson, U.. Dynamic evaluation of integrated control strategies for enhanced nitrogen removal in activated sludge processes. *Control Engineering Practice*, 14:1269– 1278, 2006.

Yuan, Z. and Keller, J.. Integrated control of nitrate recirculation and external carbon addition in a predenitrification system. *Wat. Sci. Tech.*, 48(11-12):345–354, 2003

Zhu, D. An affine scaling projective reduced hessian algorithm for minimum optimization with nonlinear equality and linear inequality constraints. *Appl. Math. Comput*, 166 (1), 131–163.2005.

## ANEXO I

### Procedimento de Escalonamento

O desempenho da solução de uma programação não linear depende da forma de como o problema é formulado e uma importante questão é o escalonamento. O objetivo do escalonamento é minimizar o tempo de resposta e a robustez do problema de otimização.

Um problema de otimização irrestrita é dito como mal escalonado se uma mudança em  $x$  produz uma mudança muito maior em  $f = f(x)$  que faz uma alteração semelhante em  $x$  em outra direção (Nocedal e Wright, 1999). A medida do mau escalonamento não é tão clara em otimizações com restrições. Alguns métodos que se dizem ser de escalonamento invariante como o algoritmo de programação quadrática seqüencial com o método de otimização BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shannon) update da Hessiana (como a rotina *fmincon* do Matlab usado neste trabalho), mas eles ainda são influenciados pelo escalonamento (Biegler e Cuthrell, 1985). Isso está relacionado a duas questões. Primeiramente, o valor inicial da hessiana é normalmente definido como uma matriz identidade. Se a verdadeira hessiana do problema escalonado está mais próximo da matriz identidade do que no modelo não escalonado, isto deveria resultar em uma melhor estimativa da hessiana e um melhor desempenho do algoritmo. Em segundo, um modelo mal escalonado é suscetível em gerar erros maiores de arredondamento, o que pode degradar o desempenho do algoritmo.

Métodos de escalonamentos utilizados, por exemplo, como parte de soluções de programas não lineares são geralmente baseados na estimativa da hessiana (Roma, 2005; Zhu, 2005). Os métodos de escalonamento relacionados com o modelo do processo ou restrições são com base nos resíduos, valores de variáveis e derivadas de primeira ordem (Jacobianas). Um modelo de processo escalonado é descrito como:

$$f(\tilde{z}) = S_n f(S_V \tilde{z}) = 0 \quad (82)$$

Com a variável escalar  $\tilde{z} = S_V^{-1} z$ , onde  $z$  é o vetor do modelo das variáveis,  $f$  é o conjunto de equações não lineares que definem o modelo, e  $S_n$  é a matriz escalonada das equações do modelo.

As restrições de igualdade linearizadas (Jacobiana das equações do modelo),  $J = \partial f(z)/\partial z$ , são usadas para análise das propriedades numéricas de problemas de otimização. Se o número condicional de  $J$ ,  $\gamma(J)$ , é grande, então o problema é dito como mal condicionado, e problemas numéricos podem ser esperados (valores grandes para o número condicional significa  $\gamma(J) > 10^6$ ) (Lid e Skogestad, 2008).



Portanto, a idéia básica do escalonamento é encontrar as matrizes  $S_n$  e  $S_V$  que minimizem o número condicional de  $J$ . Em termos matemáticos, o objetivo é resolver o problema dado por:

$$\gamma^*(J) = \min_{S_n, S_V} \gamma(S_n J S_V) \quad (83)$$

Onde  $S_V$  é a matriz diagonal formada tipicamente pelos valores das variáveis de estado. A regra geral é escalonar todas as variáveis de modo que a variável escalonada tenha um valor próximo de um. A matriz das variáveis escalonadas  $S_V(j, j) = \bar{z}_j$ , onde  $\bar{z}_j$  é um valor típico de número variável  $j$ . O valor inicial,  $z_0$ , pode ser usado neste caso.

A matriz diagonal  $S_n$  pode ser encontrada por vários métodos como descrito por Lid e Skogestad (2008). Neste trabalho é utilizado o método direto de minimizar  $\gamma^*(\bar{J})$ , onde  $\bar{J} = J S_V$ , dado  $S_V$ . O problema é encontrar  $S_n$  o qual  $\gamma^*(\bar{J}) = \min_{S_n} \gamma(S_n \bar{J})$ . Para calcular este número condicional minimizado foi definida a matriz  $M$  como

$$M = [0 \quad \bar{J}^{-1} \quad \bar{J}0] \quad (84)$$

Então, como verificado por Braatz e Morari, temos

$$\sqrt{\gamma^*(\bar{J})} = \min_D \bar{\sigma}(DMD^{-1}) \quad (85)$$

Onde  $D = \text{diag}(I, S_n)$ . Este problema de otimização convexa pode ser resolvido para o limite superior para o valor singular  $\mu_{up} = \min_D \bar{\sigma}(DMD^{-1})$  usando técnicas lineares de desigualdade de matrizes (Skogestad e Postlethwaite, 2005). Devido à presença do termo inverso  $D^{-1}$ , o problema de otimização é difícil de resolver na sua forma original, no entanto, ele pode ser transformado em uma matriz linear equivalente de desigualdade, dado por:

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}(DMD^{-1}) < \gamma &\Leftrightarrow \rho(D^{-H} M^H D^H D M D^{-1}) < \gamma^2 \\ &\Leftrightarrow D^{-H} M^H D^H D M D^{-1} - \gamma^2 I < 0 \Leftrightarrow M^H P M - \gamma^2 P < 0 \end{aligned} \quad (86)$$

Onde  $P = D^H D > \mu_{up}(M)$  pode ser encontrado resolvendo o problema de otimização dão por

$$\begin{aligned} \min \gamma^2 \\ \text{Sujeito as restrições } M^H P M - \gamma^2 P < 0 \end{aligned} \quad (87)$$

que é um problema de otimização dos autovalores generalizados (GEVP) com funções

$$F_1(P) = M^H P M \quad (88)$$

$$F_2(P) = -P \quad (89)$$

Softwares disponíveis, tais como Matlab Robust Toolbox Control podem resolver este problema de forma muito eficiente usando funções internas de matrizes lineares de

desigualdade. Um exemplo de tal utilização pode ser encontrada em Skogestad e Postlethwaite (2005).

## **ANEXO II**

## Systematic Approach to the Design of Operation and Control Policies in Activated Sludge Systems

Antonio C. B. de Araújo,<sup>\*1</sup> Simone Gallani,<sup>1</sup> Michela Mulas,<sup>4</sup> and Gustaf Olsson<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemical Engineering, Federal University of Campina Grande, 58429-140 Campina Grande, Paraíba, Brazil

<sup>2</sup>Department of Civil and Environmental Engineering, Aalto University, P.O. Box 15200, FI-00076 Aalto, Finland

<sup>3</sup>Department of Measurement Technology and Industrial Electrical Engineering, Lund University, SE-22100 Lund, Sweden

**ABSTRACT:** This article describes the systematic design of a control structure for a biological wastewater treatment process as given by the test-bed Benchmark Simulation Model No. 1 (BSM1) and Activated Sludge Model No. 1 (ASM1). The objective of this work was to formalize and implement a systematic and yet simple procedure for the selection of control structures in wastewater treatment plants (WWTPs) and to show that the application of the proposed methodology agrees with the "empirical" findings regarding the operation of this process. The motivation underlying this endeavor was to search for a control configuration that leads to optimal economic operation while promptly rejecting disturbances at lower layers in the control hierarchy, thus avoiding violation of the more important regulatory constraints on effluent discharge. We started by optimizing a steady-state nonlinear model of the process for various important disturbances. The results confirmed that it is economically optimal to control the oxygen concentration in the aerobic basins and the nitrate in the second anoxic tank at their respective lower bounds, whereas the effluent ammonia from the bioreactors should be controlled at its upper limit. In addition, because it is good practice to operate with minimal manipulation, the wastage flow rate should be fixed at its nominal optimal set point. The proposed decentralized control configuration, consisting of simple PI controllers, is capable of maintaining the process well within the regulatory limits at a small cost when dynamic disturbances represented by three weather files affect the process, therefore suggesting that, according to the applied systematic methodology, more complex (multivariable) regulators are not necessary for the ASM1 process.

### 1. INTRODUCTION

One of the most serious problems that our ecosystems currently face—and that will always be a continuous concern—is the pollution of water, with consequences that are well recognized not only by experts within the scientific community but also by the general population. In particular, regular discharges of large amounts of nutrients and organic matter into receiving water bodies can cause such problems as eutrophication and oxygen depletion that harmfully affect, on a first level, aquatic flora and fauna. Wastewater treatment facilities, working as highly complex processes, must therefore be designed and operated to mitigate the negative impacts of nuisance effluents to the environment. In the spirit of efficiency, these processes must be able to conform to increasingly stricter discharge regulations and pollutant limits and, at the same time, meet operational budget restrictions. In other words, there is an intense search for the best way to balance plant performance and cost optimization. These objectives can be incorporated at the very moment of process conception (i.e., at the design phase) and/or during operation of existing plants. In either case, the use of process control techniques, that is, the proper selection of the control structure in a broader plantwide sense, is a critical ingredient in the recipe used to provide efficient and reliable operation of such complex processes. However, right at the onset, any control structure should have a very simple architecture and be easy to operate and maintain, for the underlying reason that investments in such projects are not considered to have an attractive payback of any kind.

A myriad of different control strategies for wastewater treatment plants (WWTPs) have been proposed, many of them

exploring the COST/BWA Benchmark Simulation Model No. 1 (BSM1)<sup>1,2</sup> so that the proposals can be compared fairly within a common framework. On the optimization side, not as much work has been published, but a few articles are available that discuss approaches ranging from heuristic techniques<sup>3–5</sup> to formal optimization<sup>6–8</sup> using an explicit mathematical model of the WWTP for optimal design and operation. Many different control configuration complexities have been suggested, ranging from simple decentralized proportional–integral–derivative (PID) implementations,<sup>9–11</sup> switching strategies,<sup>12–14</sup> and fuzzy supervisory elements<sup>14,15</sup> to advanced model-based feed-forward<sup>16</sup> and gain scheduling<sup>17</sup> controllers. Wahab et al.,<sup>18</sup> Machado et al.,<sup>19</sup> Samuelsson et al.,<sup>5</sup> and Garcia-Sanz et al.<sup>20</sup> discussed the more important relative gain analysis (RGA) approach to determine the pairings between preselected controlled and manipulated variables, but those were the only contributions, at least to the authors' knowledge, that used this type of analytical tool for control configuration screening. Two common features among the aforementioned publications include the use of an external carbon source as a means to aid control of nitrate and a heuristic approach to select controlled outputs and their respective set points. The use of an external carbon source has been suggested by many authors (e.g., Alex et al.<sup>21</sup>) mainly because it is sometimes needed in denitrification processes to maintain a satisfactory carbon/nitrogen

Received: August 12, 2010

Accepted: June 2, 2011

Revised: May 30, 2011

Table 1. List of Symbols

symbol	description	units	symbol	description	units
$BOD_5$	5-day biological oxygen demand	(g of BOD)/ $m^3$	$SS^j$	oxygen concentration in basin $j$	(g of $O_2$ )/ $m^3$
$C_0$	sludge disposal production	(g of SS)/day	$SS^s$	oxygen saturation concentration	(g of $O_2$ )/ $m^3$
COD	chemical oxygen demand	(g of COD)/ $m^3$	$S_p$	sludge production	(kg of SS)/day
$E_A$	aeration energy	kWh/day	$S_0$	readily biodegradable substrate	(g of COD)/ $m^3$
$E_M$	mixing energy	kWh/day	$S_n$	right scaling matrix	—
$E_P$	pumping energy	kWh/day	SRT	sludge retention time	day
$E_Q$	effluent quality	(kg of pollution units)/day	$t_0$	initial time	day
eff	effluent	—	TN	total nitrogen concentration	(g of N)/ $m^3$
$H$	structured matrix	—	TSS	total suspended solids	(g of SS)/ $m^3$
$J$	Jacobian of the model	—	$V^j$	volume of basin $j$	$m^3$
$K_{L,A}^{(j)}$	oxygen transfer coefficient for basin $j$	$day^{-1}$	$X_{H,A}$	active heterotrophic bio mass	(g of COD)/ $m^3$
$K_{N,A}$	kinetic parameter	(g of $NO_3-N$ )/ $m^3$	$w$	wastage	—
$K_{O,A}$	kinetic parameter	(g of COD)/ $m^3$	$\alpha$	maximum singular value	—
$k_D$	sludge disposal price	\$/ton	$\eta_k$	kinetic parameter	—
$k_x$	energy price	\$/kWh	$\gamma$	condition number	—
$K_0$	kinetic parameter	(g of COD)/ $m^3$	$\gamma^*$	scaled condition number	—
MLSS	mixed liquor suspended solids	(g of SS)/ $m^3$	$\mu_H$	kinetic parameter	$day^{-1}$
$Q_0$	influent flow rate	$m^3/day$	$\omega$	frequency	rad/day
$Q_i$	internal recirculation flow rate	$m^3/day$	$\Lambda$	RGA matrix	—
$Q_r$	sludge recirculation flow rate	$m^3/day$	$\omega_c$	crossover frequency	rad/day
$Q_w$	excess sludge flow rate (wastage)	$m^3/day$	$\rho_A$	aerobic growth of heterotrophs	(g of COD)/( $m^3d$ )
$S_{NH_4}^j$	ammonia concentration in basin $j$	(g of N)/ $m^3$	$\rho_H$	anaerobic growth of heterotrophs	(g of COD)/( $m^3d$ )
$S_{NO_3}^j$	nitrate concentration in basin $j$	(g of N)/ $m^3$	$\Theta$	range of time	day
$S_n$	left scaling matrix	—			

ratio. However, in many cases, the influent wastewater composition already has a favorable C/N ratio, and the more "traditional" manipulated variables (aeration intensity for aerobic reactors, internal recirculation flow rate, return sludge flow rate, and waste sludge flow rate) might be sufficient for controlling the nitrogen inventory. Moreover, a robust control structure, among other things, is one that is simple and uses the minimum number of manipulated variables to control the system. The work of Cadet et al.<sup>14</sup> appears to be the only reference that explored the selection of output controlled variables for wastewater treatment processes. In that work, the authors proposed a selection methodology based on a sensitivity analysis (steady-state-gain calculation) and did not take into account the more important issue related to the economics of the system. Selection of controlled output is a critical step in any control structure design application and must be done properly considering the costs involved during operation for various disturbances affecting the process. This might be one reason that many proposed control architectures are not economically attractive, yielding very high operating costs and constantly exceeding regulatory limits. Another factor that might diminish the importance of some of the proposed control methodologies is their complexity. Switching strategies, fuzzy control, and gain scheduling are examples of techniques that are difficult to implement and maintain in practice, particularly when applied to wastewater treatment. It must be kept in mind that the basic rule for the control of such plant facilities should always be "keep it simple", and if this is not possible, "keep it structured".<sup>22</sup>

This contribution aims at systematically designing a control structure for a WWTP using a plantwide control procedure in such a way that optimal economic operation can be achieved while complying with regulatory constraints for effluent discharge.

Indeed, the objective was to formalize and implement a systematic and yet simple procedure for the selection of control structures in WWTPs and to show that the application of the proposed methodology agrees with the "empirical" findings regarding the operation of this process. However, it was not the objective of the work to compare the proposed methodology with previous studies on the matter. Rather, our goal was to supplement the already abundant, rich literature on control strategies of WWTPs with a well-established systematic method for control structure selection<sup>23</sup> that has not yet been applied to such challenging problems, so that the results obtained by applying this control structure design procedure agree very well with the findings of the past 10–15 years. In this sense, formal optimizations of a steady-state transcription BSM1 were conducted for various significant disturbances affecting the process as given by the weather files discussed in Alex et al.,<sup>21</sup> culminating in the selection of the most suitable output controlled variables. It is important to mention that no selection of this kind with application to WWTPs has been attempted before. A full RGA analysis of the resulting selected outputs and assigned manipulated variables was also performed as part of the design of the regulatory configuration. Dynamic simulation was then used to assist in finding the remaining set points that mitigate constraint violations.

The most important notation used in this work is summarized in Table 1.

## 2. MATERIALS AND METHODS

**2.1. Process Description.** Wastewater treatment plants aim to remove pollutants in influent wastewater by transformation and separation processes. Depending on the characteristics of the

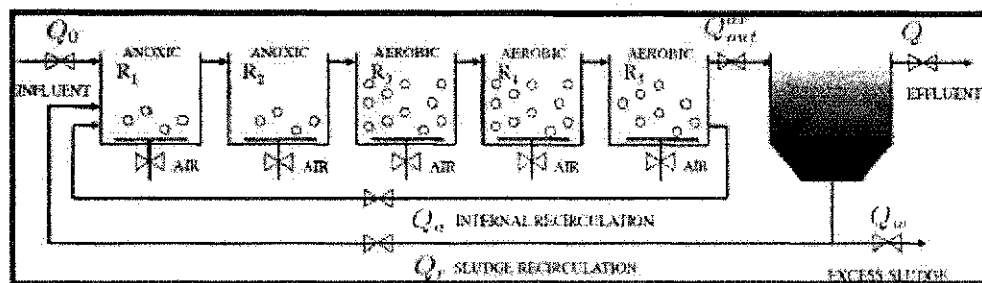


Figure 1. Schematic representation of the BSM1 activated sludge process.

wastewater, the desired effluent quality, and the environmental or social factors, the treatment can be achieved in different ways. In general, traditional wastewater treatment processes include, as a first step, the mechanical removal of floating and settleable solids, followed by a biological treatment for nutrients and organic matter abatement, sludge processing/disposal, and water chemical treatment when applicable. Here, the continuous activated sludge process is considered for the biological wastewater treatment, with the main purpose of nitrogen removal.

BSM1<sup>21</sup> represents a fully defined protocol that characterizes the process including the plant layout, influent loads, modeling and test procedures, and evaluation criteria. Figure 1 shows a schematic of the process. It consists of a bioreactor divided into five compartments: two anoxic (denitrifying) zones followed by three aerobic (nitrifying) zones. To maintain the microbiological population, the sludge from the settler is recirculated into the anoxic basin (returned activated sludge,  $Q_2$ ), and part of the mixed liquor is recycled to the inlet of the bioreactor (internal recycle,  $Q_1$ ) to enhance nitrogen removal. Moreover, excess sludge is continuously withdrawn (at the rate  $Q_3$ ) from the secondary settler underflow.

The original BSM1 layout has the following characteristic features:

- a biological treatment reactor with two anoxic zones (1000 m<sup>3</sup> each) followed by three aerobic zones (1333 m<sup>3</sup> each);
- a nonreactive secondary settler with a surface area of 1500 m<sup>2</sup> and a depth of 4 m;
- recycled flow, at the rate  $Q_1$ , from the secondary settler to the front end of the plant, with the default value  $Q_1 = 18446$  m<sup>3</sup>/day;
- nitrate internal recycle, at the rate  $Q_2$ , from the fifth to the first tank, with the default value  $Q_2 = 55338$  m<sup>3</sup>/day; and
- waste sludge flow, at the rate  $Q_3$ , continuously pumped from the secondary settler underflow, with the default value  $Q_3 = 385$  m<sup>3</sup>/day.

From a modeling point of view, the benchmark is based on two widely accepted process models: Activated Sludge Model No. 1 (ASM1)<sup>24</sup> used to model the biological processes and a nonreactive one-dimensional layer model for the settling process.<sup>25</sup> Kinetic and stoichiometric parameters are given within the benchmark description,<sup>21</sup> as well as the full model equations. [Note that, in Alex et al.,<sup>21</sup> the mass balance equation for the feed layer ( $m = 6$ ) of the settler model contains an error: The third term in the numerator of the right-hand side of the equation should read  $(v_{sp} + v_{sm})X_m$  instead of  $(v_{sp} + v_{sm})X_m$ .] In addition, influent data are provided in terms of flow rates and ASM1 state variables over a period of 14 days with a sampling time of 15 min.

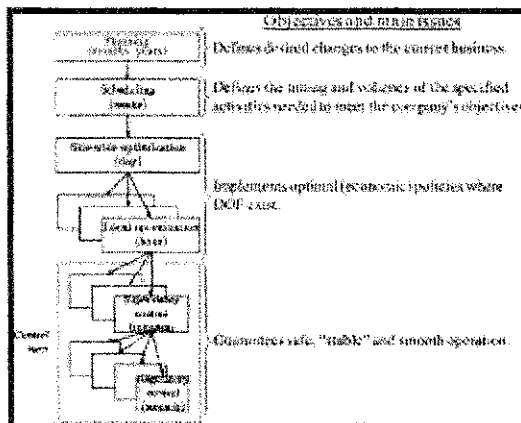


Figure 2. Typical control hierarchy in a chemical plant.

All of the information required for the proper implementation of the model in any platform can be found at the COST/IWA 624 Web site, <http://www.benchmarkwwtp.org>.

In this work, the BSM1 model<sup>21</sup> was reimplemented as a Matlab script for explicit optimization purposes and then used within Simulink as an S function for dynamic simulation. For optimization, the model was properly scaled using an advanced scaling procedure based on the minimization of the Euclidian condition number.<sup>26</sup> A comparison of the reimplemented model with the version currently available (and widely used) in Matlab/Simulink<sup>3</sup> showed that the two model implementations gave exactly the same numerical results. The files of the reimplemented model are freely available to the reader upon request.

**2.2. Outline of the Plantwide Control Procedure.** In this section, a summary of the plantwide control design procedure used in this work is presented. It is not intended to be an exhaustive discussion on the subject; instead, we give the necessary elements for a proper understanding of the main ideas behind the method.

A control system is usually divided into several layers, separated by time scale (Figure 2). The layers are linked by the controlled outputs, whereby the set points are computed by upper layers and implemented by lower layers. Control structure design, also known as plantwide control, deals with the decisions that must be made to design a complete control architecture; the simple task of placing local controllers is not the sole aim of the

plantwide control methodology. A systematic procedure for this purpose has been developed,<sup>23</sup> and successfully implemented in the well-known test-bed hydrodesalkylation (HDA) plant,<sup>27,28</sup> the ammonia synthesis process,<sup>29</sup> in the synthesis of self-optimizing control structures for recycle processes,<sup>30</sup> as a means to reduce hazardous off-gas emissions in smelter furnaces,<sup>31,32</sup> optimal operation of refrigeration cycles,<sup>33,34</sup> and optimal operation of heat exchanger networks.<sup>34</sup> The reason for choosing this approach is that the majority of the methods available in the literature for the design of control structures for industrial plants are based on heuristic arguments and do not provide a systematic basis for a rational decision.<sup>35</sup>

The plantwide control design procedure consists of a top-down analysis and bottom-up design. The top-down analysis includes the definition of operating objectives, the consideration of degrees of freedom available to meet these objectives, and the important selection of the controlled output. The bottom-up design of the control system deal with the stabilization of the process, the rejection of local disturbances, and the definition of the control configuration to be implemented in the control system. These two topics are indeed closely related in the sense that good economic performance during transients depends on the right choice of the (primary) economic controlled outputs and (secondary) regulatory controlled outputs. The idea of the plantwide control structure procedure, as given by Skogestad,<sup>23</sup> is to ensure optimal economic operation while at the same time satisfying all constraints on the process. To this end, one must first select a set of outputs that leads to optimal economic performance (top-down analysis or structural design of control systems).

The first controlled outputs to be selected are the active constraints, and they need to be controlled at their respective optimal values to achieve optimal economic operation.<sup>37</sup> Doing this requires the use of some of the degrees of freedom or control variables. Usually, there will still be some degrees of freedom left, and one needs to select unconstrained controlled outputs so that, with a constant-set-point policy, the process is kept close to its optimum despite disturbances that directly affect economics; with this approach, unnecessary reoptimization of the process when these disturbances occur can be avoided. The link between the top-down analysis and bottom-up design becomes clear if one thinks of a cascade implementation in the control hierarchy: another set of (secondary) controlled outputs must be found that can be controlled to ensure that high-frequency, normal disturbances to the plant (e.g., sudden changes in feedstock flow rate and composition, noise, product composition variations, equipment malfunctioning) are taken care of before they seriously upset the economic performance of the process at upper layers of the control hierarchy. In other words, the plant needs to be "stabilized" to operate properly. By stabilized, we mean not only that unstable modes (e.g., related to the control of level loops) are stabilized, but also that the regulatory layer should prevent the plant from drifting too far away from its nominal optimum operating point and that it should be designed such that the supervisory layer can handle the effects of disturbances on the primary outputs (active constraint and unconstrained outputs selected previously).

The plantwide control procedure therefore consists of the following steps:

#### Top-Down Analysis

Step 1. Definition of operational objectives: identify operational constraints and a scalar cost function to be minimized.

Step 2. Identification of control variables and degrees of freedom: identify dynamic and steady-state degrees of freedom.

Step 3. Selection of primary controlled outputs: control active constraints and decide for the unconstrained degrees of freedom.

#### Bottom-Up Design

Step 4. Design of the regulatory control layer: stabilize the plant using a low-complexity controller (single-loop PID controllers) such that (a) the plant does not drift too far away from its nominal operating point and (b) the supervisory layer (or the operators) can easily handle the effects of disturbances on the primary outputs.

Step 5. Design of the supervisory control layer: keep (primary) economic controlled outputs at optimal set points.

Step 6. Design of the optimization layer [real-time optimization (RTO)]: identify active constraints and compute optimal set points for controlled outputs.

Step 7. Validation: perform nonlinear simulations with the proposed control structure installed.

It should be clear from the preceding discussion that the optimization of the process is not the central issue in the control structure design procedure. Indeed, the bottom-up design, namely, the regulatory control configuration, is as important as the economic configuration determined by the top-down analysis.

For the optimization of the process, we used the steady-state version of the process model. One might argue that, in general, nothing guarantees that a steady-state optimization is appropriate for any dynamic plant with time-varying disturbances. Indeed, no control strategy approach developed so far by the control engineering community is capable of guaranteeing "appropriate" dynamic performance for processes subject to time-varying disturbances. One approach that seems very promising is dynamic real-time optimization (DRTO), namely, nonlinear model predictive control (NMPC), but even this approach could doubtfully guarantee anything because of its difficult implementation. The use of steady-state models for control structure selection is extensively discussed in the article by Morari et al.,<sup>38</sup> who used a pseudo-steady-state model in which the basic principle of the control structure is to deal with rapidly changing disturbances on the regulatory level so that slow disturbances are handled at the supervisory control level and the economic performance is optimized most of the time.

A comment on the important step 2 above is warranted here. As stated by Skogestad,<sup>23</sup> one starts with the number of dynamic or control degrees of freedom,  $N_m$  ( $m$  here denotes manipulated), which is equal to the number of manipulated variables.  $N_m$  is usually easily obtained by process insight as the number of independent variables that can be manipulated by external means from step 1 in the procedure (typically, the number of adjustable valves plus other adjustable electrical and mechanical variables). Note that the original manipulated variables are always extensive variables. Next, one must identify the  $N_{opt}$  optimization degrees of freedom, that is, the degrees of freedom that affect the operating cost. In most cases, the cost depends on the steady state only, and  $N_{opt}$  equals the number of steady-state degrees of freedom,  $N_{ss}$ . To obtain the number of steady-state degrees of freedom, one must subtract the following quantities from  $N_m$ : (a)  $N_{Q_{ext}}$ , the number of manipulated (input) variables with no

steady-state effect (or more generally, with no effect on the cost), which are typically "extra" manipulated variables used to improve the dynamic response (e.g., an extra bypass on a heat exchanger), and (b)  $N_{op}$ , the number of (output) variables that need to be controlled but that have no steady-state effect (or more generally, no effect on the cost), which are typically liquid levels in holdup tanks. Finally, one obtains  $N_{opt} = N_m = N_{in} - (N_{con} + N_{op})$ .

### 3. RESULTS

**3.1. Top-Down Analysis of the Wastewater Treatment Plant.** In this section, we focus on steps 1–3 of the procedure described in the preceding section, starting with the definition of optimal operation. It is worth mentioning that, at this stage of the procedure, a nonlinear steady-state model of the process is the main requirement and the analysis is based on steady-state considerations only.

The operating costs in a wastewater treatment plant depend on the wastewater system itself and can be divided into man-power, energy, maintenance, chemicals usage, chemical sludge treatment, and disposal costs. The objective is basically to reduce the costs of energy and sludge disposal as much as possible. Therefore, in this work, the following costs are considered:

- pumping costs due to the required pumping energy ( $E_p$  expressed in kWh/day),
- pumping costs due to the required aeration energy ( $E_A$  expressed in kWh/day),
- mixing energy due to the required mixing when the aeration is too low ( $E_M$  expressed in kWh/day), and
- sludge disposal costs ( $C_D$  expressed in \$/day).

To express the partial costs over a certain range of time  $\Theta$ , we adopt the expression proposed in Alex et al.<sup>21</sup> The total energy due to the required pumping energy depends directly on the recycle flow ( $Q_r$ ), the internal recycle ( $Q_i$ ) and the waste sludge flow rate ( $Q_w$ )

$$E_p \text{ (kWh/day)} = \frac{1}{\Theta} \int_{t_0}^{t_0 + \Theta} [0.004Q_r(t) + 0.008Q_i(t) + 0.05Q_w(t)] dt \quad (1)$$

with the flow rates in  $m^3/\text{day}$ . The aeration energy can be calculated as a function of the oxygen saturation concentration ( $S_{O_2}^{sat}$ ), the volume of the bioreactor zones ( $V$ ), and  $K_1 a$

$$E_A \text{ (kWh/day)} = \frac{S_{O_2}^{sat}}{\Theta \times 1.8 \times 1000} \int_{t_0}^{t_0 + \Theta} \sum_{i=1}^5 V_i K_1 a^{(i)}(t) dt \quad (2)$$

with  $K_1 a$  expressed in  $\text{day}^{-1}$  and  $i$  referring to the reactor zone number. The anoxic zones should be mixed to avoid settling, and in addition to the aeration system, mechanical mixing might also be supplied. The mixing energy is then a function of the compartment volume

$$E_M \text{ (kWh/day)} = \begin{cases} \frac{24}{\Theta} \int_{t_0}^{t_0 + \Theta} \sum_{i=1}^5 0.005V_i dt & \text{if } K_1 a^{(i)}(t) < 20 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3)$$

The sludge disposal production per day is expressed as

$$C_D \text{ [(g of SS)/day]} = \frac{1}{\Theta} \int_{t_0}^{t_0 + \Theta} [TSS_w(t) Q_w(t)] dt \quad (4)$$

Table 2. Constraints on the Process

constraint	units	status
$0 \leq S_{O_2}^{(1)} \leq 0.5$	(g of $O_2$ )/ $m^3$	operational constraint
$1.5 \leq S_{O_2}^{(4)} \leq 4$	(g of $O_2$ )/ $m^3$	operational constraint
$7 \leq \text{SRT} \leq 20$	day	operational constraint
$1 \leq S_{NH_4}^{(1)} \leq 2$	(g of N)/ $m^3$	operational constraint
$0 \leq \text{COD}^{(1)} \leq 100$	(g of COD)/ $m^3$	regulatory constraint
$0 \leq \text{TSS}^{(1)} \leq 30$	(g of SS)/ $m^3$	regulatory constraint
$0 \leq \text{TN}^{(1)} \leq 18$	(g of N)/ $m^3$	regulatory constraint
$0 \leq \text{BOD}_5^{(1)} \leq 10$	(g of BOD)/ $m^3$	regulatory constraint
$0 \leq S_{NH_4}^{(2)} \leq 4$	(g of N)/ $m^3$	regulatory constraint
$0 \leq Q_r \leq 2000$	$m^3/\text{day}$	manipulation constraint
$0 \leq Q_i \leq 70000$	$m^3/\text{day}$	manipulation constraint
$0 \leq Q_w \leq 100000$	$m^3/\text{day}$	manipulation constraint
$0 \leq K_1 a^{(1)} \leq 360$	$\text{day}^{-1}$	manipulation constraint

where  $\text{TSS}^{(w)}$  represents the total suspended solids wasted with  $Q_w$ . Assuming a constant energy price of  $k_E = 0.09$  \$/kWh and a sludge disposal price of  $k_D = 80$  \$/ton, the total energy cost in \$/day can be calculated as

$$\text{cost (\$/day)} = k_E(E_p + E_A + E_M) + k_D C_D \quad (5)$$

The overall cost function in 5 is then averaged over time for steady-state purposes and minimized subject to regulations for the effluent and some constraints related to process operability. These constraints are listed in Table 2.

The constraints on the residual oxygen concentration,  $S_{O_2}$ , are defined because, at low oxygen concentration [ $\leq 0.5$  (g of  $O_2$ )/ $m^3$ ], nitrification is greatly inhibited,<sup>39</sup> thus necessitating the operational constraints for anoxic basins 1 and 2. On the other hand, to guarantee degradation of organic matter and good settleability and quality of the activated sludge, a higher oxygen concentration is required in the aerobic tanks 3–5, where the upper limit of 4 (g of  $O_2$ )/ $m^3$  is used to improve the nitrification rate.<sup>39</sup> The lower bounds on  $S_{NH_4}^{(1)}$  are based on the suggestion of Metcalf and Eddy<sup>39</sup> that, in the aerobic zones, the oxygen should not limit the growth of microorganisms because, otherwise, filamentous microorganisms can predominate and the settleability and quality of activated sludge can become poor. Particularly the lower bound of 1.5 (g of  $O_2$ )/ $m^3$  was found on a trial-and-error basis until convergence of optimization runs for the various disturbances was no longer achieved. The limits on the sludge retention time (SRT) were also taken from Metcalf and Eddy,<sup>39</sup> and they reflect the seasonal change in temperature during normal operations of a WWTP. The constraints on nitrate,  $S_{NO_3}$ , in the second basin are imposed so as to avoid/minimize the use of an external carbon source;<sup>40</sup> moreover, as also recommended by Okson et al.,<sup>40</sup> "The nitrate recirculation flow should be controlled such that the nitrate concentration at the end of the anoxic zone is maintained at a low but non-zero level [e.g., 1–2 (g of N)/ $m^3$ ]. Several researches and practitioners have recommended this control strategy. While practically it is always difficult to prove that a particular strategy yields the optimal performance, a carbon-based mass balance analysis strongly suggests that the strategy would maximize the removal of nitrate." The effluent regulatory constraints on COD, TSS, TN,  $\text{BOD}_5$ , and  $S_{NH_4}$  were taken from Alex et al.<sup>21</sup> The values for the manipulation constraints were taken from Shen et al.<sup>41,42</sup>

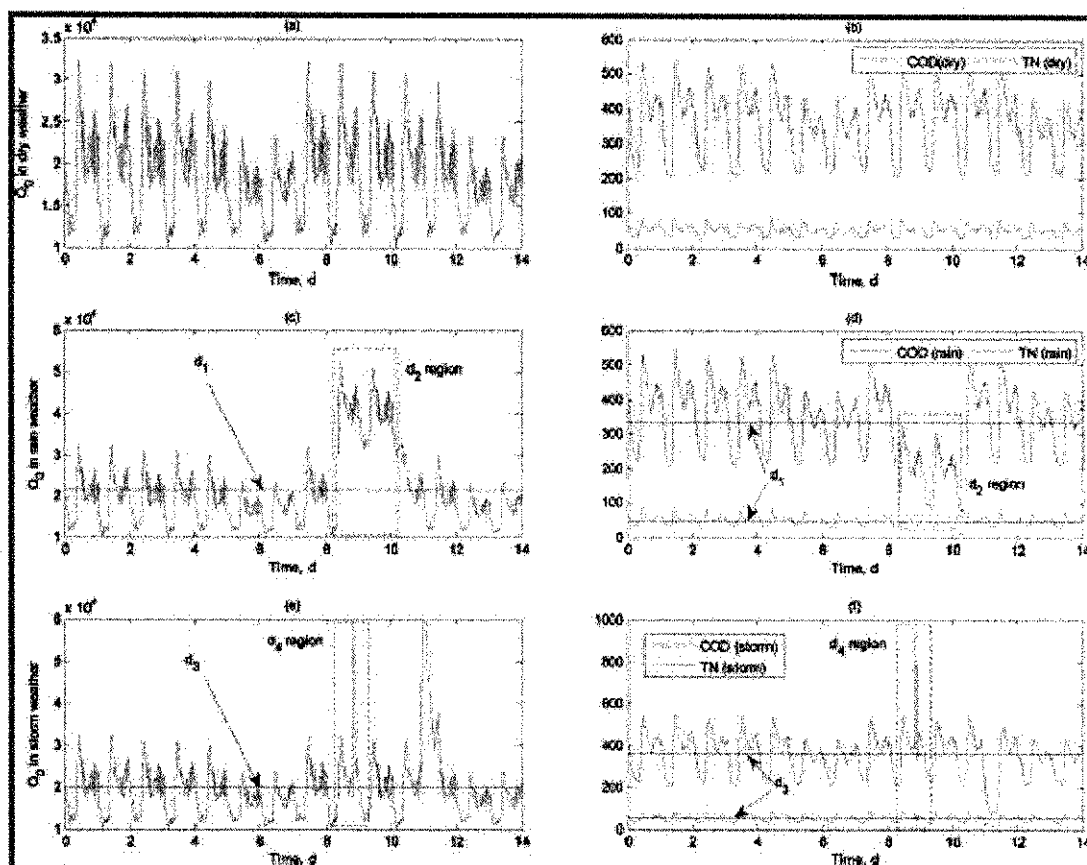


Figure 3. Influent flow rate and organic and nutrient compounds for the given weather events<sup>21</sup> (considered steady-state optimization disturbances are highlighted).

We consider six manipulated variables (last four entries in Table 2), which correspond to six dynamic and steady-state degrees of freedom, as no unstable modes need to be controlled because the levels in the tanks and at the secondary settler are self-regulated by the overflow layout assumed for the plant.

Compared to other process industries, wastewater treatment plants are subject to very large disturbances because of daily, weekly, and seasonal variations in the incoming wastewater. In this work, we consider the influent load data as given by the IWA Task Group on the benchmark Web site. The data are presented in terms of ASM1 state variables and influent flow rates. In general, these data reflect expected diurnal variations in weekdays that are typical for normal load behavior at a municipality treatment facility. Three different weather/influent conditions are considered in three different data sets, and from those data sets, different disturbances are deduced for our purposes:

(1) The dry weather file (Figure 3a,b) gives what are considered to be normal diurnal variations in flow and organic pollutant loads. In the following analysis, the average input compositions and flow rate are considered as nominal conditions for the BSM1 plant.

(2) The rain event file (Figure 3c,d) represents a long rain event.

(3) The storm event file (Figure 3e,f) is a variation of the dry weather file incorporating storms. The first storm event in this file is of high intensity and short duration. The second storm event assumes that the sewers were cleaned of particulate matter during the first storm event; hence, only a modest increase in COD load is noted during the second storm.

As step-change disturbances for steady-state optimizations, we consider different conditions from the different data sets. Starting from the nominal conditions, average values of influent during dry weather, Table 3 summarizes the given disturbances in terms of influent flow rate and influent load. The average composition and flow rate,  $d_1$ , and the average values for the process inputs during the rain period, denoted  $d_2$ , were taken from the rain weather situation in Figure 3c,d. From Figure 3e,f one can identify the given disturbances as  $d_3$  representing the average conditions during the whole period and  $d_4$  representing the average during the storm time. For dynamic simulations, when testing the proposed control configurations, we considered all three short-term weather files described above. In fact, one



particular advantage of studying this process is the availability of the disturbance profiles, because their use definitely aids in

designing the appropriate control structure because it eases the output variable selection, as seen later. The importance of disturbance modeling is well-documented in Germaey et al.<sup>45</sup>

Table 3. Disturbances of the Process

	$Q_D$ ( $m^3/day$ )	COD <sup>(m)</sup> ( $g\ of\ COD/m^3$ )	TSS <sup>(m)</sup> ( $g\ of\ SS/m^3$ )	TN <sup>(m)</sup> ( $g\ of\ N/m^3$ )
nominal	18446	383	211	54
$d_1$	21320	333	183	48
$d_2$	40817	204	116	28
$d_3$	19746	353	195	50
$d_4$	34288	281	101	37

To achieve optimal operation, we first choose to control the active constraints,<sup>37</sup> whereas the difficult issue of deciding which unconstrained variables to control is resolved by recurring to the concept of self-optimizing control.<sup>16</sup> The starting point for the selection of primary (economic) variables is the optimization of the process for the various known, deterministic disturbances already defined.

The BSM1 model was reimplemented as a script in Matlab, and optimizations were performed for each condition imposed

Table 4. Effects of Disturbances on Optimal Values of Selected Variables in the System

variable	units	BSM1	nominal	$d_1$	$d_2$	$d_3$	$d_4$
cost	\$/day	554.19	518.42	521.59	577.65	512.75	675.19
$E_p$	\$/day	34.94	17.95	23.42	58.22	20.01	48.98
$E_A$	\$/day	300.72	269.13	272.60	300.98	266.71	346.03
$E_M$	\$/day	21.60	21.60	21.60	21.60	21.60	21.60
$C_{O_2}$	\$/day	196.93	209.74	204.17	196.85	204.43	258.58
$S_{O_2}^{(1)}$	( $g\ of\ O_2/m^3$ )	0.004	0.008	0.009	0.021	0.009	0.015
$S_{N_2}^{(1)}$	( $g\ of\ N/m^3$ )	5.37	3.06	2.81	1.92	2.91	2.26
$S_{NH_4}^{(1)}$	( $g\ of\ N/m^3$ )	7.92	12.63	11.55	7.23	11.88	8.66
$S_{O_2}^{(2)}$	( $g\ of\ O_2/m^3$ )	0.0001	0.0001	0.0001	0.0005	0.0001	0.0003
$S_{N_2}^{(2)}$	( $g\ of\ N/m^3$ )	4	1	1	1	1	1
$S_{NH_4}^{(2)}$	( $g\ of\ N/m^3$ )	8.34	13.38	12.22	7.61	12.58	9.19
$S_{O_2}^{(3)}$	( $g\ of\ O_2/m^3$ )	1.7	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5
$S_{N_2}^{(3)}$	( $g\ of\ N/m^3$ )	6.54	4.32	3.89	2.25	4.02	2.80
$S_{NH_4}^{(3)}$	( $g\ of\ N/m^3$ )	5.55	9.88	9.16	6.32	9.38	7.31
$S_{O_2}^{(4)}$	( $g\ of\ O_2/m^3$ )	2.4	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5
$S_{N_2}^{(4)}$	( $g\ of\ N/m^3$ )	9.30	7.56	6.70	3.46	6.97	4.54
$S_{NH_4}^{(4)}$	( $g\ of\ N/m^3$ )	2.97	6.73	6.40	5.11	6.50	5.56
$S_{O_2}^{(5)}$	( $g\ of\ O_2/m^3$ )	0.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5
$S_{N_2}^{(5)}$	( $g\ of\ N/m^3$ )	10.42	10.57	9.33	4.63	9.71	6.19
$S_{NH_4}^{(5)}$	( $g\ of\ N/m^3$ )	2	4	4	4	4	4
MLSS	( $g\ of\ SS/m^3$ )	3269.84	2665.30	2664.10	3250.66	2632.64	3757.92
SRT	day	9.17	14.64	7.57	8.02	9.56	8.17
FM	( $g\ of\ COD)/(g\ of\ SS\ day)$	0.36	0.44	0.44	0.43	0.44	0.43
COD <sup>(m)</sup>	( $g\ of\ COD/m^3$ )	47.55	45.89	45.34	46.21	45.71	48.38
TSS <sup>(m)</sup>	( $g\ of\ SS/m^3$ )	12.50	11.24	12.48	22.51	11.72	20.41
TN <sup>(m)</sup>	( $g\ of\ N/m^3$ )	14.05	16.42	15.32	11.61	15.63	12.97
BOD <sup>(m)</sup>	( $g\ of\ BOD/m^3$ )	2.65	2.52	2.82	4.75	2.64	4.31
$S_{NH_4}^{(m)}$	( $g\ of\ N/m^3$ )	2	4	4	4	4	4
TSS <sup>(w)</sup>	( $g\ of\ SS/m^3$ )	6393.98	12536.71	7109.79	6227.71	10022.80	7128.59
$S_{NH_4}^{(w)}$	( $g\ of\ N/m^3$ )	10.42	10.57	9.33	4.63	9.71	6.19
$Q_w$	$m^3/day$	385.00	209.13	358.96	385.32	254.96	453.43
$Q_1$	$m^3/day$	18446.00	4694.20	12143.13	43435.64	6687.56	37061.86
$Q_2$	$m^3/day$	55338.00	37688.37	36289.81	69912.59	39079.90	56268.36
$Q_w/Q_D$	-	0.021	0.011	0.017	0.019	0.013	0.013
$Q_1/Q_D$	-	1.00	0.25	0.57	1.06	0.34	1.08
$K_{1p}^{(N)}$	$day^{-1}$	240.00	191.48	193.60	216.42	189.76	244.97
$K_{1a}^{(O)}$	$day^{-1}$	240.00	165.11	166.59	179.05	163.26	209.11
$K_{1a}^{(N)}$	$day^{-1}$	84.00	148.15	150.69	160.01	147.18	194.88
$Q_D$	$m^3/day$	18446.00	18446.00	21320.00	40817.00	19746.00	34288.00
COD <sup>(w)</sup>	( $g\ of\ COD/m^3$ )	381.00	381.00	333.00	204.00	353.00	281.00
TSS <sup>(w)</sup>	( $g\ of\ SS/m^3$ )	211.00	211.00	183.00	116.00	195.00	101.00
TN <sup>(w)</sup>	( $g\ of\ N/m^3$ )	54.00	54.00	48.00	28.00	50.00	37.00

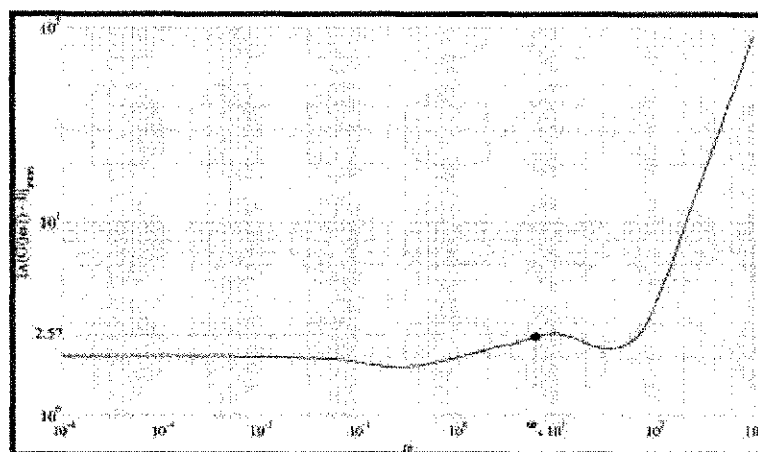


Figure 4. RGA number of the linearized model of the process as a function of frequency.

by the selected disturbances in Table 3 subjected to the constraints given in Table 2. The built-in Matlab subroutine `fmincon` was the optimizer of choice. However, as a means to improve convergence of the sequential quadratic programming (SQP) algorithm, a scaling of the model was conducted because it was found that the Jacobian of the model equations ( $J$ ) around the nominal operating point calculated by Alex et al.<sup>21</sup> is affected by severe ill-conditioning [conditional number of  $J$ ,  $\gamma(J)$ , on the order  $10^9$ ], and numerical problems could arise.<sup>44</sup> (In fact, numerical problems did occur when we tried to optimize the model without scaling, and convergence could not be achieved.) The scaling procedure is thoroughly described in Brastz and Moran,<sup>26</sup> and an example of its implementation is given in Skogestad and Postlethwaite.<sup>43</sup> Some details of the scaling procedure used in this work are given in the Appendix. After scaling, the condition number of  $J$  was reduced from  $\gamma(J) = 2 \times 10^9$  to  $\gamma(S_p/S_n) = 5 \times 10^2$ , and all optimization runs converged within a few seconds.

The results of the optimizations can be seen in Table 4, which gives the values of selected variables involved in the process and the effect of disturbances on the cost. Five constraints are always active, namely,  $S_{O_2}^{(1)}$  (lower bound),  $S_{O_2}^{(2)}$  (lower bound),  $S_{O_2}^{(3)}$  (lower bound),  $S_{NH_4}^{(1)}$  (lower bound), and  $S_{NH_4}^{(2)}$  (upper bound). The fact that the residual oxygen concentrations are active at their lower bounds was already expected because aeration ( $E_A$ ) is one of the main cost contributors in a wastewater treatment plant, because the transfer efficiency of oxygen from gas to liquid is relatively low, so that only a small amount of oxygen supplied is used by microorganism. For the same reason, free ammonia is active at its upper bound, as nitrification is an oxygen-demanding process. A reasonable explanation for why  $S_{NH_4}^{(2)}$  is active at its lower bound is that the system tries to maximize the use of influent biodegradable COD for denitrification and, thus, maximizes the nitrate removal in the anoxic zone. Indeed, this result confirms that the nitrate recirculation flow should be such that  $S_{NO_3}^{(2)}$  at the end of the anoxic zone is kept at a low but nonzero level.<sup>40</sup>

Also in Table 4, the column labeled BSM1 shows the results of the original steady-state model as given by Alex et al.<sup>21</sup> The cost at the nominal optimum is about 7% smaller than that of the original BSM1 model, especially because of the reduction in

aeration energy and, to a lesser degree, pumping energy ( $E_p$ ). The disturbance that most influences the cost is related to the storm weather,  $d_{st}$ , and the reason for this is the increased loads of COD (24% larger than nominal) and ammonia nitrogen (22% larger than nominal) in the influent, which, in turn, greatly increase aeration and sludge disposal costs. Under optimal conditions, we can roughly conclude that the plant is more costly to operate during stormy events than during rainy events. It is worth noticing that, because the settler is modeled as a non-reactive process, the ammonia concentration in the effluent matches, at least at steady state, that in the last aerobic tank, and this also applies for all other soluble components. In practice, however, the conditions in the settler are anoxic and favor denitrification, with an improved final total nitrogen about 15% smaller than under the nonreactive assumption.<sup>48</sup>

As the five active constraints must be implemented to ensure optimal operation,<sup>37</sup> one degree of freedom remains. In the next section, we dynamically simulate the process for the three weather files with the aim of finding a suitable controlled variable that gives feasible operation with respect to the more important regulatory constraints and, at the same time, results in low operating costs.

**3.2. Bottom-Up Design of the Wastewater Treatment Plant.** We start by determining the regulatory control configuration. One of the main issues in this step is to ensure "stable" and smooth operation. By stable, we mean not only the mathematical stabilization of unstable modes (e.g., related to control of level loops), but also the ability of the regulatory layer to prevent the plant from drifting too far from its nominal optimum operating point on a short time scale and the ability of the supervisory layer (or the operators) to handle the effects of disturbances in the primary outputs. For the WWTP process, levels are self-regulated through the overflow of wastewater from one tank to the next, so level control is not a concern; moreover, flow control of air added to the three aerobic basins is necessary to guarantee that the right amount of oxygen is supplied. We also include flow control of  $Q_4$  and  $Q_5$ . Altogether, we then have five loops closed at the regulatory control layer.

The intended aim of the supervisory control layer is to keep the primary (economic) controlled variables at their optimal set

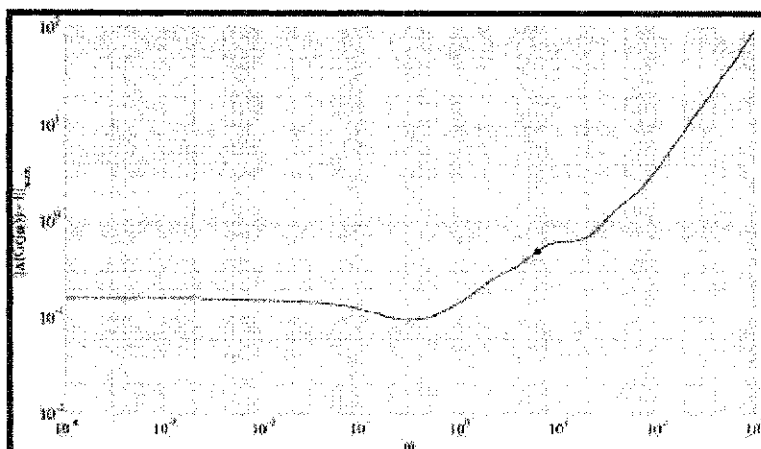


Figure 5. RGA number as a function of frequency for the partially controlled linearized model of the process.

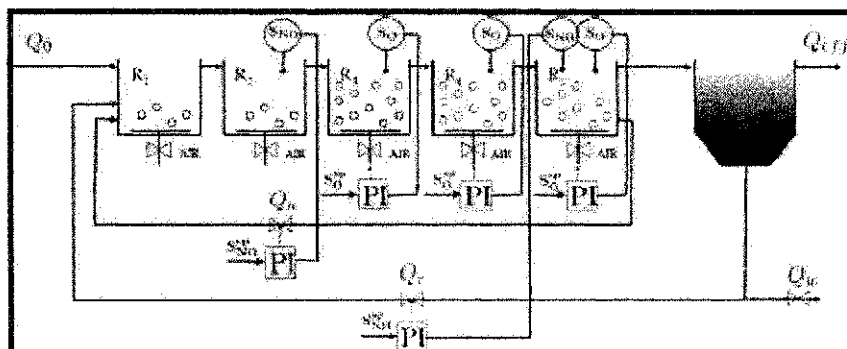


Figure 6. Control configuration based on the RGA analysis.

Table 5. Tuning Parameters

loop	set point	$K_c$	$\tau$ (day)
$S_1^{(3)} \times K_{1,a}^{(3)}$	1.5 (g of $O_2$ )/ $m^3$	1000 $m^3$ /[(g of $O_2$ ) day]	0.003
$S_2^{(4)} \times K_{2,a}^{(4)}$	1.5 (g of $O_2$ )/ $m^3$	1000 $m^3$ /[(g of $O_2$ ) day]	0.003
$S_3^{(5)} \times K_{3,a}^{(5)}$	1.5 (g of $O_2$ )/ $m^3$	1000 $m^3$ /[(g of $O_2$ ) day]	0.003
$S_4^{(6)} \times Q_6$	1.0 (g of N)/ $m^3$	30000 $m^3$ /[(g of N) day]	2.4
$S_5^{(7)} \times Q_7$	4.0 (g of N)/ $m^3$	15000 $m^3$ /[(g of N) day]	2.4

points to minimize operating costs. As the variable selection dictated, the active constraints  $S_1^{(3)}$ ,  $S_2^{(4)}$ ,  $S_3^{(5)}$ ,  $S_4^{(6)}$ , and  $S_5^{(7)}$  should be controlled. As a means to improve control of  $S_5^{(7)}$ , it is more prudent to control  $S_5^{(6)}$  instead because the settler can serve as a low-pass filter to damp large dynamic variations in  $S_5^{(6)}$ . Moreover,  $S_5^{(6)}$  is not less of an active constraint than  $S_5^{(7)}$  is.

Although pairing of controlled variables with manipulated variables might seem obvious for the WWTP, we performed a relative gain analysis (RGA) to check for loop interactions. The steady-state RGA matrix  $[A(\omega = 0)]$  of an open-loop linearized model of the plant around the nominal optimum operating point is given in eq. 1, where  $u = [K_{1,a}^{(3)} K_{1,a}^{(4)}$

$K_{1,a}^{(5)} Q_6 Q_7]$  and  $y = [S_1^{(3)} S_2^{(4)} S_3^{(5)} S_4^{(6)} S_5^{(7)}]$ . The numbers in bold in eq. 1 represent the pairing choices because they are the closest to unity.

$$A(\omega = 0) = \begin{bmatrix} K_{1,a}^{(3)} & K_{1,a}^{(4)} & K_{1,a}^{(5)} & Q_6 & Q_7 \\ 0.841 & 0.008 & 0.002 & -0.013 & 0.003 \\ -0.020 & \mathbf{0.845} & 0.012 & -0.012 & 0.010 \\ -0.029 & -0.015 & \mathbf{0.966} & -0.009 & 0.017 \\ -0.042 & -0.008 & 0.007 & \mathbf{1.061} & 0.001 \\ 0.052 & 0.000 & 0.027 & -0.005 & \mathbf{0.839} \end{bmatrix} \quad (6)$$

The frequency-domain interpretation of the RGA indicates how dynamics should be considered in the pairing of inputs and outputs.<sup>43</sup> Pairings for which the relative gains at the gain crossover frequency ( $\omega_c$ ) are close to 1 are recommended. Moreover, if the RGA elements around  $\omega_c$  are large, the plant is inherently difficult to control mainly because of sensitivity to errors in the model parameters. Applied to our case, for the frequency where control is important [i.e., for the frequency of the disturbances ( $\omega_c \approx 2\pi$  rad/day)], the RGA magnitude in eq. 6 also shows the same pairing choice. Notice that the RGA

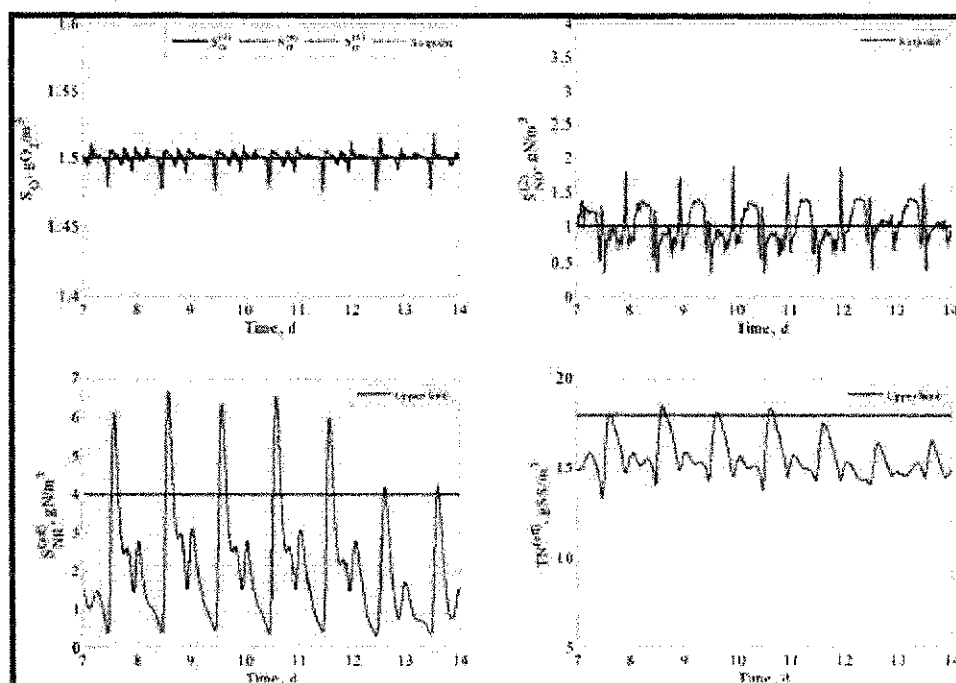


Figure 7. Closed-loop responses of the system for dry weather data with no feed-forward action.

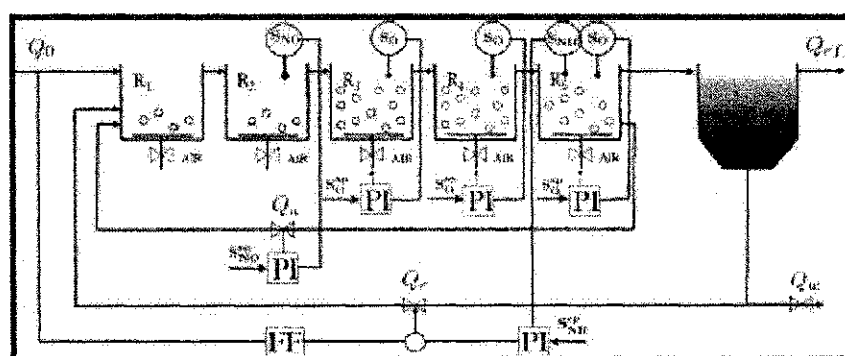


Figure 8. Control configuration with feed-forward action.

elements are small in magnitude, and we should expect no problem controlling the plant.<sup>43</sup>

$$A(s, \omega) = \begin{bmatrix} S_{O_2} \\ S_{NO} \\ S_{NH_4} \\ S_{TEMP} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{10}e^{sT} & K_{11}e^{sT} & K_{12}e^{sT} & d_1 & q_1 \\ 0.028 & 0.071 & 0.017 & 0.011 & 0.158 \\ 0.021 & 0.038 & 0.074 & 0.031 & 0.171 \\ 0.071 & 0.060 & 0.076 & 0.581 & 0.039 \\ 0.145 & 0.135 & 0.086 & 0.348 & 0.524 \end{bmatrix} \quad (3)$$

Alternatively, one can compute the so-called RGA number, defined as  $\|A[G(j\omega)] - I\|_{\infty}$  as a function of frequency, which

should be small around the crossover frequency ( $\omega_c$ ).<sup>44</sup> A plot of the RGA number (Figure 4) shows that, at frequencies up to ca. 100 rad/day, the selected pairings give good dynamic performance because the RGA number is comparable to that of the steady-state RGA ( $\omega \approx 0$ ).

Practical experience can be confirmed by the RGA computations that control of oxygen in the aerobic basins can be made tight because the individual RGA elements are close to unity not only at steady state but also at the crossover frequency ( $\omega_c$ ); the same applies to the control of nitrate in the last anoxic tank. Control of  $S_{NH_4}^{(S)}$  seems difficult (RGA element of  $\sim 0.5$ ). However,

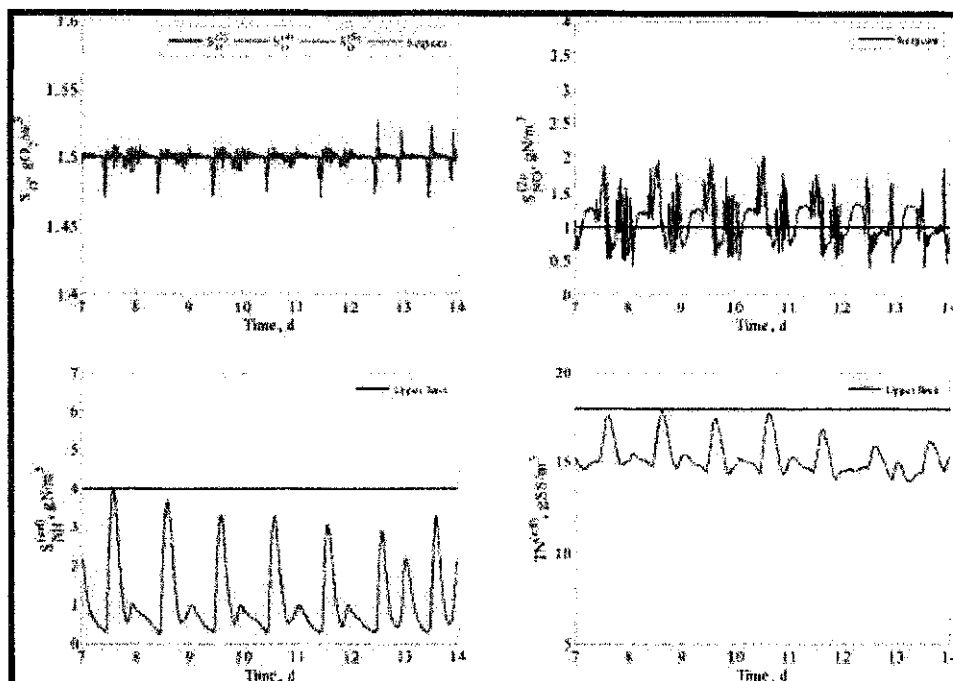


Figure 9. Closed-loop responses of the system for dry weather data with feed-forward control action on  $Q_c$ .

tight control of oxygen has a good potential to reject most disturbances on nitrate and ammonia effluent (both in the supervisory control layer), as seen in eq 4 and Figure 5, in which we assume perfect control of  $S_{PO_2}^{(2)}$  and compute the RGA of the remaining open-loop plant. Therefore, control of  $S_{PO_2}^{(2)}$  can be seen as part of an intermediate regulatory layer to aid control of effluent ammonia.

$$\Delta(\dot{Q}_c) = -D_c \begin{bmatrix} Q_c & Q_c \\ S_{NH_4}^{(2)} & 0.960 \\ S_{NO_3}^{(2)} & 0.000 \end{bmatrix} \quad (8)$$

$$\Delta(NH_4) = D_{NH_4} \begin{bmatrix} Q_c & Q_c \\ S_{NH_4}^{(2)} & 0.902 \\ S_{NO_3}^{(2)} & 0.120 \end{bmatrix} \quad (9)$$

As discussed above, there is still one degree of freedom left, and a suitable controlled variable must be found that gives improved transient and economic performance when disturbances occur. To this end, we used dynamic simulations with the above loops closed (Figure 6). As the last controlled variable, we chose to keep  $Q_c$  constant at its nominal optimum set point because it is always good practice to operate with minimal manipulation. For the simulations, we assumed an ideal sensor for oxygen measurement but a delay of 10 min in the  $S_{NO_3}^{(2)}$  and  $S_{NH_4}^{(2)}$  measurements. The PI-controller tuning parameters calculated by applying the simple internal model control (SIMC) tuning rules<sup>47</sup> are given in Table 5. Moreover, we included antiwindup in all PI controllers to avoid unnecessarily large control actions in case of input saturation.

Figure 7 shows the responses of selected variables upon application of the dry weather data to the proposed control configuration under nominal optimal initial conditions (only the last 7 days are reported, as suggested by Alex et al.<sup>21</sup>). One can readily see the obviously unacceptable violations for effluent ammonia and total nitrogen. This might be due to the strong coupling with the tight oxygen control and control of nitrate, as predicted by the results of the RGA analysis. One way to circumvent this problem is to include feed-forward action. An easy disturbance measurement that is always available is the feed flow rate  $Q_{in}$ , and we use this to enhance control of nitrate, and hence of  $TN^{(NH_4)}$ , by making the output of the feed-forward controller act on  $Q_c$ . A simple ratio configuration suffices, and we assume solely a gain of 5 on the feed flow rate deviation, that is,  $\Delta Q_c / \Delta Q_{in} = 5$ . This feed-forward/feedback control configuration is shown in Figure 8. Figure 9 shows the results for the dry weather data, where the improvement is clear, with no violations whatsoever. Simulations were also performed for the rain and storm weather files, and the results also exhibit no violations with respect to the regulatory constraints (see Figures 10 and 11, respectively).

#### 4. DISCUSSION

This article is focused on the application of a plantwide procedure to design a control structure for the BSM1/ASMI wastewater treatment system. The work is based on a steady-state analysis of a nonlinear model of the plant followed by a transient validation of the proposed control configuration, and the idea is to minimize operating costs for different disturbance scenarios as listed in Table 3, subject to the most important requirement of

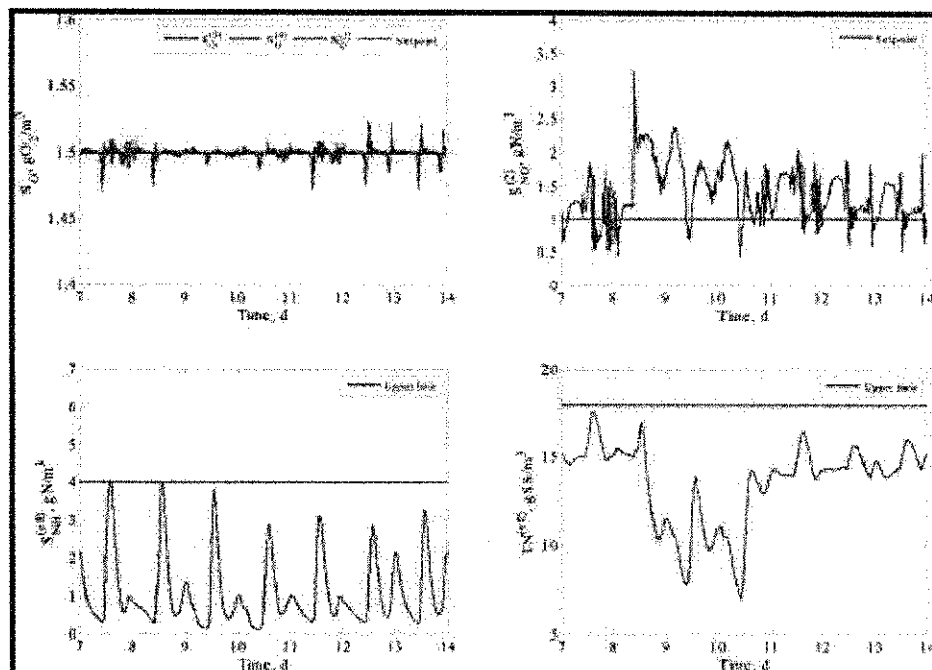


Figure 10. Closed-loop responses of the system for rain weather data with feed-forward action on  $Q_2$ .

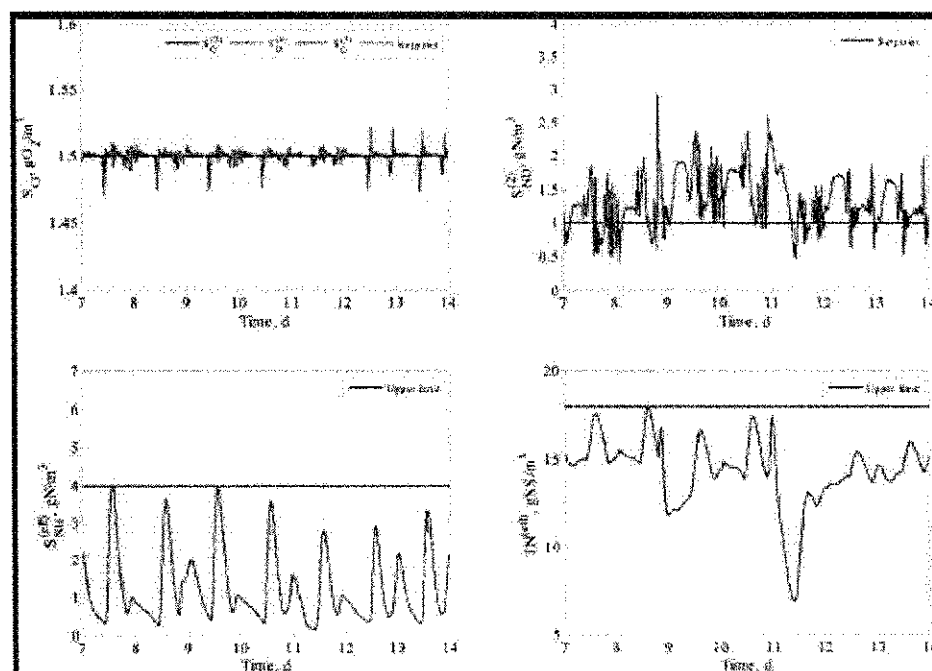


Figure 11. Closed-loop responses of the system for storm weather data with feed-forward control action on  $Q_2$ .

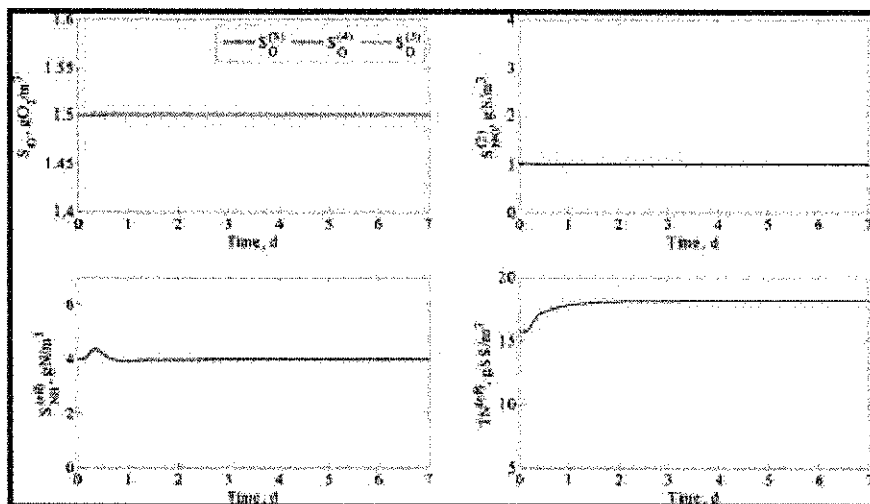


Figure 12. Closed-loop results for a step of +10% in ammonia feed concentration showing a quick transient response.

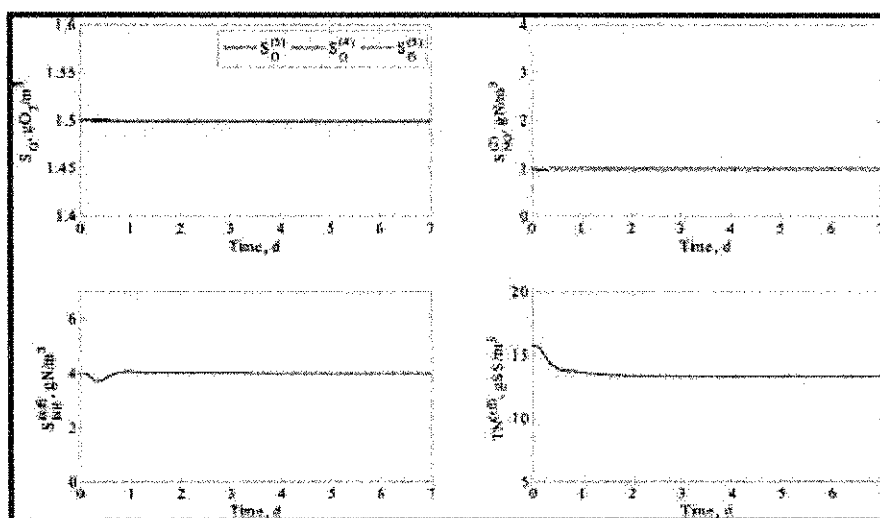


Figure 13. Closed-loop results for a step of -10% in ammonia feed concentration showing a quick transient response.

delivering effluent within the regulatory constraints given in Table 2. However, some aspects of the application of the aforementioned procedure to WWTPs need to be addressed.

The optimization results showed that it is economically optimal to keep the oxygen levels in the aerobic basins at a minimum and ammonia in the effluent at the maximum bound to save on aeration costs. Moreover, nitrate should be kept at its lower limit because costs for sludge disposal are therefore reduced. This fact is indeed known from empirical experience, but this work shows that it is possible to reach this type of conclusion with a systematic analysis. With those variables controlled at their respective optimal set points (active constraint

control), a choice had to be made in the selection of the last degree of freedom. Usually, this last output should be selected by calculating the loss derived when it is kept constant at its nominal set point for the whole set of disturbances.<sup>36</sup> However, in this particular test-bed case, the choice was made based on more practical grounds because it is always desirable to use minimal manipulation. Hence,  $Q_w$  was chosen as the "unconstrained" controlled variable, and the simulations showed that good dynamic performance (i.e., with no violation of the more important regulatory constraints) was achieved. Furthermore,  $Q_w$  affects the process only on a time scale larger than the process crossover frequency because it directly influences the sludge age and inventory.

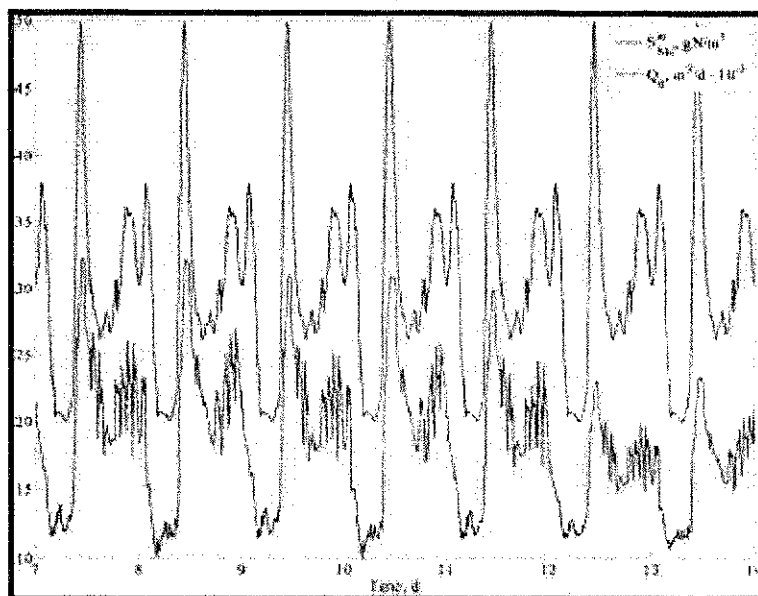


Figure 14. Disturbances in  $Q_0$  and  $S_{NH_4}^{(in)}$  for the dry weather file.

As a complement, it might be interesting to provide some step-response test of the suggested control strategy to determine how fast the disturbance could be rejected by the suggested control structure. We chose to step-test the process for disturbances in the ammonia influent (feed) concentration, as  $S_{NH_4}^{(in)}$  is one of the most important controlled variables. The dynamic results for a  $\pm 10\%$  step in the nominal ammonia feed concentration are seen in Figures 12 and 13. Considering that the actual disturbance frequency is around  $2\pi$  rad/day and that the settling time in those step responses is about 1 day, one can say that the process rejects disturbances quite quickly. It is convenient to mention that time-valued results for some controlled variables leading to short-term infeasibility are obviously inevitable because the effect of oscillatory compensation is not taking place.

A comment on the feed-forward strategy used in this work is warranted here. As control of the other outputs is relatively easy to achieve, we chose to use a feed-forward element to help keep the ammonia concentration in the effluent below its maximum allowable bound. As a result, total nitrogen also remained below its upper limit. Nevertheless, this strategy was only possible because ammonia in the influent and the feed flow rate are not lagged as shown in Figure 14. That is, a peak in  $S_{NH_4}^{(in)}$  corresponds to a peak in  $Q_0$ . Indeed, one should measure  $S_{NH_4}^{(in)}$  in addition to  $Q_0$  and use the load  $Q_0 S_{NH_4}^{(in)}$  as the feed-forward output. However, measuring  $S_{NH_4}^{(in)}$  in the effluent can be difficult and would unnecessarily introduce another measurement device into the process. Unfortunately, a downside of this approach is that it causes saturation of  $Q_0$  because, in order for it to be efficient, it has to immediately change the recirculation flow by a factor of 5, which corresponds, for example, to a  $\Delta Q_0$  value of about 30% more than the upper bound on  $Q_0$  when  $\Delta Q_0$  increases by a factor of around 2 as for disturbances  $d_1$  and  $d_4$ . However, some authors also reported input saturation problems, especially related to the recirculation flows when no external carbon source is available.

Therefore, control of this process seems to be fundamentally difficult because of excessive input usage, and only a thorough controllability analysis could definitely detect whether the plant is input-output controllable with the available handles.

## 5. CONCLUSIONS

This article discussed the design of a control structure for a wastewater treatment process using a plantwide control procedure. The resulting control structure successfully fulfills the task of controlling the plant by keeping the variables related to the regulation constraints within their limits while operating at the lowest possible cost. Despite its simplicity, with only one "complex" feed-forward controller included, the final control configuration shows very good transient performance while effectively rejecting typical disturbances in the process.

## APPENDIX: OUTLINE OF THE SCALING PROCEDURE

The performance of a nonlinear programming (NLP) solver depends on how the problem is formulated, and an important issue is proper scaling. The objective of the scaling is to minimize the computation time and robustness of the optimization problem.

An unconstrained optimization problem is said to be poorly scaled if a change in  $x$  in one direction produces a much larger change in  $f = f(x)$  than does a similar change in  $x$  in another direction.<sup>43</sup> The measure of poor scaling is not as clear in constrained optimization. Some of the methods are said to be scaling-invariant, such as the SQP algorithm with BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shannon) update of the Hessian (as in the Matlab `fmincon` routine used in this article), but they are still influenced by scaling.<sup>42</sup> This is related to two issues. First, the initial value of the Hessian is normally set equal to the identity matrix. If the true Hessian of the scaled problem is closer to the identity matrix than the unscaled model, this should result in a



improved estimate of the Hessian and improved performance of the algorithm. Second, a poorly scaled model is likely to generate larger rounding errors, which might degrade the performance of the algorithm.

Scaling methods used within or as a part of a NLP solver are generally based on properties of the estimated Hessian.<sup>46,47</sup> The scaling methods related to the process model or constraints are based on residuals, variable values and first-order derivatives (Jacobian). A scaled process model is written as

$$f(\bar{z}) = S_m f(S_z z) = 0 \quad (10)$$

with the scaled variable  $\bar{z} = S_z^{-1} z$  where  $z$  is the vector of model variables,  $f$  is the set of nonlinear equations defining the model, and  $S_m$  is the scaling matrix of the modeling equations.

The linearized equality constraints (Jacobian of the model equations),  $J = \partial f(z)/\partial z$ , are used for analysis of the numerical properties of the optimization problem. If the condition number of  $J$ ,  $\gamma(J)$ , is large, then the problem is said to be ill-conditioned, and numerical problems can be expected [here, large means  $\gamma(J) > 10^6$ ].<sup>44</sup>

Therefore, the basic idea of the scaling is to find matrices  $S_m$  and  $S_z$  that minimize the condition number of  $J$ . In mathematical terms, the goal is to solve the problem given by

$$\gamma^*(J) = \min_{S_m, S_z} \gamma(S_m J S_z) \quad (11)$$

where  $S_z$  is a diagonal matrix formed by typical values of the state variables. The general rule is to scale all variables such that the scaled variable has a value close to one. The variable scaling matrix  $S_z(j,j) = \bar{x}_j$ , where  $\bar{x}_j$  is a typical value of variable number  $j$ . The initial value,  $z_0$ , can be used in this case.

The diagonal matrix  $S_m$  can be found by several methods as described in Lid and Skogestad.<sup>44</sup> Here, we chose to use the more direct method of minimizing  $\gamma^*(J)$ , where  $\bar{J} = JS_m$  with given  $S_z$ . The problem is then to find  $S_m$  such that  $\gamma^*(\bar{J}) = \min_{S_m} \gamma(S_m \bar{J})$ . To compute this minimized condition number, we define the matrix  $M$  as

$$M = \begin{bmatrix} 0 & J^{-1} \bar{J} \end{bmatrix} \quad (12)$$

Then, as verified by Braatz and Morari,<sup>46</sup> we have

$$\sqrt{\gamma^*(J)} = \min_D \sigma(DMD^{-1}) \quad (13)$$

where  $D = \text{diag}(I, S_m)$ . This convex optimization problem can be equivalently solved for the upper bound on the structured singular value  $\mu_{\text{up}} = \min_D \alpha(DMD^{-1})$  using linear matrix inequality techniques.<sup>48</sup> Because of the presence of the inverse term,  $D^{-1}$ , the optimization problem is difficult to solve in its original form; however, it can be transformed into the equivalent linear matrix inequality (LMI) problem given by the equation

$$\begin{aligned} \sigma(DMD^{-1}) < \gamma &\rightarrow \rho(D^{-H} M^H D^H D M D^{-1}) < \gamma^2 \\ \rightarrow D^{-H} M^H D^H D M D^{-1} - \gamma^2 I < 0 &\rightarrow M^H P M - \gamma^2 P < 0 \end{aligned} \quad (14)$$

where  $P = D^H D > 0$ ,  $\mu_{\text{up}}(M)$  can be found by solving the optimization problem given by

$$\begin{aligned} \min \gamma^2 \\ \text{s.t. } M^H P M - \gamma^2 P < 0 \end{aligned} \quad (15)$$

which is a generalized eigenvalue problem (GEVP) with the functions

$$F_1(P) = M^H P M \quad (16)$$

$$F_2(P) = -P \quad (17)$$

Available software such as Matlab Robust Control Toolbox can solve this problem very efficiently using LMI built-in functions. An example of such an application can be found in chapter 12 of Skogestad and Postlethwaite.<sup>45</sup>

## AUTHOR INFORMATION

### Corresponding Author

\*E-mail: antonio@deq.ufeg.edu.br.

## REFERENCES

- (1) Alex, J.; Beteau, J. P.; Copp, J. B.; Hellings, C.; Jeppsson, U.; Marais-Libelli, S.; Pons, M. N.; Spanjers, H.; Vanhooren, H. Benchmark for evaluating control strategies in wastewater treatment plants. In *European Control Conference (ECC'99)*; Karlsruhe, Germany, August 31–September 3, 1999; p BM10.
- (2) Copp, J. B. *The COST Simulation Benchmark: Description and Simulator Manual*; Copp, J. B., Ed.; Office for Official Publications of the European Communities: Luxembourg, 2002.
- (3) Stare, A.; Vrecko, D.; Hvala, S.; Strmcnik, S. Comparison of control strategies for nitrogen removal in an activated sludge process in terms of operating costs: A simulation study. *Water Res.* 2007, 41, 2004–2014.
- (4) Ingkhem, P.; Olsson, G.; Yuan, Z. A hedging point strategy—Balancing effluent quality, economy and robustness in the control of wastewater treatment plants. *Water Sci. Technol.* 2002, 45 (4–5), 317–324.
- (5) Samuelsson, P.; Halvarsson, B.; Carlsson, B. Cost-efficient operation of a denitrifying activated sludge process. *Water Res.* 2005, 41, 2325–2332.
- (6) Ayasa, E.; Goya, B.; Larrea, A.; Larrea, L.; Rivas, A. Selection of operational strategies in activated sludge processes based on optimization algorithms. *Water Sci. Technol.* 1998, 37 (2), 327–334.
- (7) Rivas, A.; Irizar, L.; Ayasa, E. Model-based optimization of wastewater treatment plants design. *Environ. Model. Software* 2008, 23, 435–450.
- (8) Chachuat, B.; Roche, N.; Latif, M. A. Dynamic optimization of small size wastewater treatment plants including nitrification and denitrification processes. *Comput. Chem. Eng.* 2001, 25, 585–593.
- (9) Vrecko, D.; Hvala, S.; Kocijan, J. Wastewater treatment benchmark: What can be achieved with simple control. *Water Sci. Technol.* 2002, 45 (4–5), 127–134.
- (10) Ma, Y.; Peng, Y.; Wang, S. New automatic strategies for sludge recycling and wastage for the optimum operation of pre-denitrification processes. *J. Chem. Technol. Biotechnol.* 2006, 81, 41–47.
- (11) Lundborg, J. Strategies for optimized nitrate reduction with primary denitrification. *Water Sci. Technol.* 1992, 26 (5–6), 1087–1096.
- (12) Yong, M.; Yongzhen, P.; Jeppsson, U. Dynamic evaluation of integrated control strategies for enhanced nitrogen removal in activated sludge processes. *Control Eng. Pract.* 2006, 14, 1269–1278.
- (13) Yuan, Z.; Keller, J. Integrated control of nitrate recirculation and external carbon addition in a pre-denitrification system. *Water Sci. Technol.* 2003, 48 (11–12), 345–354.
- (14) Cadet, C.; P, B. J.; Hernandez, S. C. Multicriteria control strategy for cost/quality compromise in wastewater treatment plants. *Control Eng. Pract.* 2004, 12, 335–347.
- (15) Serralla, J.; Ribes, J.; Seco, A.; Ferrer, J. A supervisory system for optimizing nitrogen removal and aeration energy consumption in wastewater treatment plants. *Water Sci. Technol.* 2002, 45 (4–5), 309–316.

- (16) Vrecko, D.; Hvala, N.; Carlsson, B. Feedforward-feedback control of an activated sludge process: A simulation study. *Water Sci Technol* 2003, 47 (12), 19-26.
- (17) Carlsson, B.; Rehnström, A. Control of an activated sludge process with nitrogen removal—A benchmark study. *Water Sci Technol* 2002, 45 (4-5), 135-142.
- (18) Wahab, N. A.; Kasebi, R.; Bakkerud, J. Multivariable PID control design for activated sludge process with nitrification and denitrification. *Biosci Eng J* 2009, 45, 239-248.
- (19) Machado, V. C.; Gabriel, D.; Lafuente, J.; Banaś, J. A. Cost and effluent quality controllers design based on the relative gain array for a nutrient removal wwp. *Water Res* 2009, 43, 5129-5141.
- (20) Garcia-Añez, M.; Eguino, L.; Gil-Martinez, M.; Iribar, I.; Ayesa, E. MIMO quantitative robust control of a wastewater treatment plant for biological removal of nitrogen and phosphorus. In *16th Mediterranean Conference on Control and Automation*; IEEE: Ajaccio, France, June 25-27, 2008; pp 541-546.
- (21) Alex, J.; Benedetti, L.; Copp, J.; Gernaey, K. V.; Jeppsson, U.; Nopens, I.; Pons, M. N.; Rieger, L.; Rosen, C.; Steyer, J. P.; Vanrolleghem, P.; Winder, S. Benchmark Simulation Model no. 1 (BSM1); Technical Report, Department of Industrial Electrical Engineering and Automation, Lund University: Lund, Sweden, 2008.
- (22) Nielsen, M. K. Control of wastewater systems in practice. In *Instrumentation Control and Automation Conference*; IWA: Malmö, Sweden, June 3-7, 2001; p IWAI.
- (23) Skogestad, S. Control structure design for complete chemical plants. *Comput Chem Eng* 2004, 28, 219-234.
- (24) Henze, M.; Grady, L. C. P.; Gujer, W.; Maric, G. V. R.; Matsuo, T. *Activated Sludge Model no. 1 (ASMI)*. Scientific and Technical Report no. 1; IAWQ: London, 1987.
- (25) Takao, I.; Patry, G. G.; Nielsen, D. A dynamic model of the clarification-thickening process. *Water Res* 1991, 29 (10), 1263-1271.
- (26) Braatz, R. D.; Morari, M. Minimizing the euclidean condition number. *SIAM J Control Optim* 1994, 32 (6), 1763-1768.
- (27) Araújo, A. C. B.; Govatsmark, M.; Skogestad, S. Application of plantwide control to the HDA process. I—Steady-state optimization and self-optimizing control. *Control Eng Pract* 2007, 15, 1223-1237.
- (28) Araújo, A. C. B.; Hori, E. S.; Skogestad, S. Application of plantwide control to the HDA process. II—Regulatory control. *Ind Eng Chem Res* 2007, 46, 5159-5174.
- (29) Araújo, A.; Skogestad, S. Control structure design for the ammonia synthesis process. *Comput Chem Eng* 2008, 32 (13), 2920-2932.
- (30) Baldea, M.; Araújo, A.; Skogestad, S.; Douvatzis, P. Dynamic considerations in the synthesis of self-optimizing control structures. *AIChE J* 2008, 54, 1830-1841.
- (31) Araújo, A.; Shung, H. Enhancing a smelter off-gas system using a plantwide control design. *Ind Eng Chem Res* 2009, 48 (6), 3004-3013.
- (32) Araújo, A. C. B.; Brito, R. P.; Shung, H. Mitigation of energy intensity of an industrial off-gas cleaning system using process engineering solutions. *J Cleaner Prod* 2009, 17, 1512-1525.
- (33) Jensen, J. B.; Skogestad, S. Optimal operation of simple refrigeration cycles. Part I: Degrees of freedom and optimality of sub-cooling. *Comput Chem Eng* 2007, 31, 712-721.
- (34) Jensen, J. B.; Skogestad, S. Optimal operation of simple refrigeration cycles. Part II: Selection of controlled variables. *Comput Chem Eng* 2007, 31, 1590-1601.
- (35) Lerbamningrak, V.; Samphakun, T.; Narasimhan, S.; Skogestad, S. Control structure design for optimal operation of heat exchanger networks. *AIChE J* 2008, 54 (1), 150-162.
- (36) Skogestad, S. Plantwide control: The search for the self-optimizing control structure. *J Process Control* 2000, 10, 487-507.
- (37) Marleveld, A.; Rijnsdorp, J. E. Constraint control on distillation columns. *Automatica* 1979, 15, 51-58.
- (38) Morari, M.; Stephanopoulos, G.; Aron, Y. Studies in the synthesis of control structures for chemical processes. Part I: formulation of the problem, process decomposition and the classification of the control task, analysis of the optimizing control structures. *AIChE J* 1980, 26 (2), 220-232.
- (39) Tchobanoglous, G.; Burton, F. L.; Stensel, H. D. *Wastewater Engineering: Treatment and Reuse*, 4th ed.; McGraw-Hill: New York, 2003.
- (40) Glason, G.; Nielsen, M. K.; Yuan, Z.; Lynggaard-Jensen, A.; Steyer, J. P. *Instrumentation Control and Automation in Wastewater Systems*; IWA Publishing: London, 2005.
- (41) Shen, W.; Chen, X.; Corriou, J. P. Application of model predictive control to the BSM1 benchmark of wastewater treatment process. *Comput Chem Eng* 2008, 32, 2849-2856.
- (42) Shen, W.; Chen, X.; Pons, M. N.; Corriou, J. P. Model predictive control for wastewater treatment process with feedforward compensation. *Chem Eng J* 2009, 155, 161-174.
- (43) Gernaey, K. V.; Rosen, C.; Jeppsson, U. WWTP dynamic disturbance modelling—An essential module for long-term benchmarking development. *Water Sci Technol* 2006, 53 (4-5), 255-234.
- (44) Lül, T.; Skogestad, S. Scaled steady state models for effective on-line applications. *Comput Chem Eng* 2008, 32, 990-999.
- (45) Skogestad, S.; Postlethwaite, I. *Multivariable Feedback Control: Analysis and Design*; John Wiley & Sons: Chichester, U.K., 2005.
- (46) Gernaey, K. V.; Jeppsson, U.; Batstone, D. J.; Ingólaen, P. Impact of reactive settler models on simulated WWTP performance. *Water Sci Technol* 2006, 53 (1), 159-167.
- (47) Skogestad, S. Simple analytic rules for model reduction and PID controller tuning. *Model Ident Control* 2004, 25 (2), 85-129.
- (48) Nocedal, J.; Wright, S. J. *Numerical Optimization*; Springer Series in Operations Research; Springer: New York, 1999.
- (49) Biegler, L. T.; Cuthrell, J. E. Improved feasible path optimization for sequential modular simulators—II: The optimization algorithm. *Comput Chem Eng* 1985, 9 (3), 257-267.
- (50) Roma, M. Dynamic scaling based preconditioning for truncated newton methods in large scale unconstrained optimization. *Optim Methods Software* 2005, 20 (6), 693-713.
- (51) Zhu, D. An affine scaling projective reduced hessian algorithm for minimum optimization with nonlinear equality and linear inequality constraints. *Appl Math Comput* 2005, 166 (1), 131-163.

## Sensitivity Analysis of Optimal Operation of an Activated Sludge Process Model for Economic Controlled Variable Selection

Antonio C. B. de Araujo,<sup>†\*</sup> Simone Gallani,<sup>‡</sup> Michela Mulas,<sup>‡</sup> and Sigurd Skogestad<sup>§</sup>

<sup>†</sup>Department of Chemical Engineering, Federal University of Campina Grande, 58429-900 Campina Grande, Paraíba, Brazil

<sup>‡</sup>Department of Civil and Environmental Engineering, Aalto University, P.O. Box 15200, FI-00076 Aalto, Finland

<sup>§</sup>Department of Chemical Engineering, Norwegian University of Science and Technology, N-7491 Trondheim, Norway

**ABSTRACT:** This paper describes a systematic sensitivity analysis of optimal operation conducted on an activated sludge process model based on the test-bed benchmark simulation model no. 1 (BSM1) and the activated sludge model no. 1 (ASM1). The objective is to search for a control structure that leads to optimal economic operation, while promptly rejecting disturbances at lower layers in the control hierarchy avoiding thus violation of the more important regulation constraints on effluent discharge. We start by optimizing a steady-state nonlinear model of the process. Here, a new steady-state secondary settler mathematical model is developed based on the theory of partial differential equations applied to the conservation law with discontinuous fluxes. The resulting active constraints must be chosen as economic controlled variables. These are the effluent ammonia from the bioreaction section and the final effluent total suspended solids at their respective upper limits, in addition to the internal recycle flow rate at its lower bound. The remaining degrees of freedom need to be fulfilled, and we use several local (linear) sensitivity methods to find a set of unconstrained controlled variables that minimizes the loss between actual and optimal operation; particularly we choose to control linear combinations of readily available measurements so to minimize the effect of disturbances and implementation errors on the optimal static performance of the plant. It is expected that the proposed methodology and results obtained therein can be used in practice as general rules-of-thumb to be tested in actual wastewater treatment plants of the kind discussed in this paper.

### 1. INTRODUCTION

Operation of wastewater treatment plants (WWTP) has been the focus of intense research for at least the past 20 years as seen from the myriad of paper contributions to the field (see, for example, Olsson and Newell,<sup>1</sup> Olsson et al.,<sup>2</sup> and Olsson<sup>3</sup>). These facilities, working as highly complex processes, should be designed and operated in a way to mitigate the negative impact of nuisance influent to the environment in order to conform to increasingly stricter discharge regulations and pollutant limits and at the same time meet tight operational budget restrictions.

Although optimization of wastewater treatment plants has gained interest in both scientific and industrial communities, surprisingly only few articles discuss the subject either from a heuristic economic point of view<sup>4–6</sup> or by formal optimization using an explicit mathematical model of the process<sup>7–11</sup> for optimal design and operation. However, none of the publications define an optimal operation policy from a systematic viewpoint. Araujo et al.<sup>12</sup> applied a systematic procedure for control structure design of an activated sludge process in which optimization for various operational conditions were carried out using a mathematical model of the process, where they imposed additional operational constraints to the process following heuristics found in the WWTP literature, for example, bounds restricting residual oxygen in the anoxic and aerobic reactors, sludge retention time (SRT) being constrained, and nitrate concentration lying within specified limits. In fact, these variables should be let to vary freely so that their optimal values constitute the result of the optimization.

One important outcome of a systematic optimization procedure is the definition of variables that should be controlled to ensure optimal economic operation, namely, the active constraints, and, if there are still degrees of freedom left, the unconstrained variables that when kept constant at their optimal nominal set points lead to near-optimal operation avoiding the need for reoptimizing the process when disturbances occur (the so-called self-optimizing control technology).<sup>23</sup> Except for Cadet et al.<sup>24</sup> and Araujo et al.,<sup>12</sup> no other reference was found that explored the selection of output controlled variables for wastewater treatment processes. However, Cadet et al.<sup>24</sup> proposed a selection methodology based on a sensitivity analysis (steady-state gain calculation) and did not consider the more important issue related to the economics of the system. On the other hand, although Araujo et al.<sup>12</sup> used a systematic procedure for the selection of controlled variables, the limitations previously discussed about their work gave incomplete information on the truly optimal operation policy for the kind of activated sludge process object of their analysis.

In this paper, a systematic sensitivity analysis of optimal operation of an activated sludge process model based on the benchmark simulation model no. 1 (BSM1)<sup>25</sup> is conducted. It must be clear that all analysis, and hence all conclusions, from this work are based on the underlying mathematical model of

Received: March 1, 2013

Revised: June 23, 2013

Accepted: June 23, 2013

Published: June 24, 2013





Table 1. List of Symbols

symbol	description	unit	symbol	description	unit
$BOD_5$	5 day biological oxygen demand	gBOD/ $m^3$	$Q_1$	flow rate to aeration	$m^3/d$
$c$	set of controlled variables		$Q_2$	sludge recirculation flow rate	$m^3/d$
$c^*$	set of optimal values of controlled variables		$Q_3$	sludge flow rate from settler bottom	$m^3/d$
$d$	disturbances (disturbance or set)		$Q_w$	wastage sludge flow rate (wastage)	$m^3/d$
$G_d$	sludge disposal production	gSS/d	$n_1$	particle behavior for increasing particle density	
COD	chemical oxygen demand	gCOD/ $m^3$	$n_2$	particle behavior at weak concentration values	
eff	effluent superscript		$S_{NH}^j$	ammonia concentration in basin $j$	gN/ $m^3$
$E_a$	aeration energy	WWh/d	$S_{NO}^j$	nitrate concentration in basin $j$	gN/ $m^3$
$E_m$	mixing energy	WWh/d	$S_{O_2}^j$	oxygen concentration in basin $j$	gO <sub>2</sub> / $m^3$
$E_p$	pumping energy	WWh/d	$S_{O_2}^*$	oxygen saturation concentration	gO <sub>2</sub> / $m^3$
$F$	flux function		SRT	sludge retention time	d
$F$	optimal measurement sensitivity matrix		$t$	time	d
$G^*$	gain matrix from the unconstrained degrees of freedom to the measurements		TN	total nitrogen concentration	gN/ $m^3$
$G_d^*$	Gain matrix from the disturbances to the measurements		TSS	total suspended solids	gSS/ $m^3$
$H$	constraint (in-equality) matrix		$u$	unconstrained degrees of freedom	
$J$	cost function		$u^*$	degrees of freedom used to control active constraints	
$J_u$	Hessian matrix with respect to the unconstrained degrees of freedom		$u^{opt}$	optimal values of the unconstrained degrees of freedom	
$J_{ud}$	Hessian matrix with respect to the unconstrained degrees of freedom and disturbances		$u_0$	original steady-state degrees of freedom	
$K_{Lj}^{opt}$	oxygen transfer coefficient for basin $j$	$d^{-1}$	$u_0^{opt}$	optimal values of the original steady-state degrees of freedom	
$L$	economic loss		$V^j$	volume of basin $j$	$m^3$
$l_d$	sludge disposal price	$\$/ton$	$v_m$	theoretical maximum velocity	$m/d$
$l_e$	energy price	$\$/kWh$	$v_p$	practical maximum velocity	$m/d$
$K_c$	kinetic parameter	gCOD/ $m^3$	$v_s$	settling velocity	$m/d$
MLSS	mixed liquor suspended solids	gSS/ $m^3$	$w$	wastage subscript	
$n_d$	number of disturbance variables		$W_d$	disturbance scaling matrix	
$n_m$	number of available measurements		$W_m$	measurement scaling matrix	
$n_u$	number of unconstrained degrees of freedom		$X$	flocculated solids concentration	gSS/ $m^3$
$n_c$	number of degrees of freedom used to control active constraints		$y$	set of measurement variables	
$n_o$	number of original degrees of freedom		$z$	spatial coordinate	$m$
$\sigma$	measurement errors		$\alpha$	wastage flux	$m^3/(d \cdot m^2)$
$q$	flux	$m^3/(d \cdot m^2)$	$\delta$	data measure	
$Q^{(in)}$	influent flow rate	$m^3/d$	$\theta$	maximum angular value	
$Q_1$	influent recirculation flow rate	$m^3/d$	(eff)	effluent superscript	
			(in)	inflow rate to the WWT plant superscript	

the process and should not be considered as definite guidelines for actual plant operation since the mathematical model may not be able to reproduce many real plant situations. However, the results can be used in practice as general rules-of-thumb to be tested in actual wastewater treatment plants of the kind discussed here. The paper is organized as follows: In section 2, a short description of the process and relevant modeling issues are discussed. Here, a new steady-state secondary settler mathematical model is developed based on the theory of partial differential equations applied to the conservation law with discontinuous fluxes.<sup>36–39</sup> Section 3 gives an outline of the methodology used for sensitivity analysis, emphasizing the importance of variable selection for optimal operation. Application of these guidelines to a revised BSM1 is given in section 4. Discussion of the results are presented in section 5, and some conclusions are drawn in section 6. The most important notation is summarized in Table 1.

## 2. PROCESS DESCRIPTION

Wastewater treatment plants are very complex units designed to remove pollutants in the influent wastewater by biological reaction and separation (settling) processes. Depending on the characteristics of the wastewater, the desired effluent quality, and the environmental or social factors, the treatment can be achieved in different ways. In general, traditional wastewater treatment processes include, as a first step, a mechanical removal of floating and settleable solids, followed by a biological treatment for nutrients and organic matter abatement with secondary settling for separation of suspended solids, a sludge processing/disposal unit, and water chemical treatment when applicable. Here the continuous activated sludge process is considered for the biological wastewater treatment with the main purpose of nitrogen and carbon compound removal.

The BSM1<sup>14</sup> represents a fully defined protocol that characterizes the process including the plant layout, influent

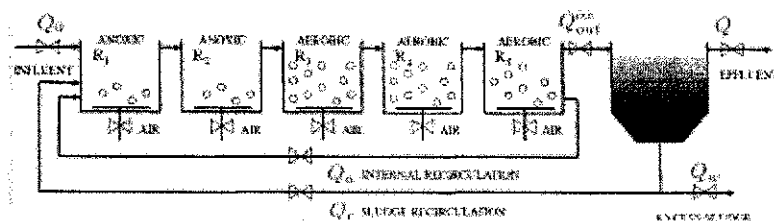


Figure 1. Schematic representation of the BSM1 activated sludge process.

loads, modeling and test procedures, and evaluation criteria. Figure 1 shows a schematic of the process consisting of a bioreaction section divided in five compartments, which can be anoxic or aerobic, and a secondary settling device. In order to maintain the microbiological population, sludge from the settler is recirculated into the reaction section (returned activated sludge,  $Q_r$ ). Also, part of the mixed liquor leaving the last reactor can be recycled to the inlet of the bioreactor (internal recycle,  $Q_i$ ) to enhance nitrogen removal. Moreover, excess sludge at a rate  $Q_s$  is continuously withdrawn from the settler underflow.

The original BSM1 layout has the following characteristic features: biological treatment reactor with two anoxic zones (1000 m<sup>3</sup> each) followed by three aerobic zones (1333 m<sup>3</sup> each); nonreactive secondary settler with a surface of 1500 m<sup>2</sup> and 4 m depth; recycled flow,  $Q_r$ , from the secondary settler to the front end of the plant; nitrate internal recycle,  $Q_i$ , from the fifth to the first tank; waste sludge flow rate,  $Q_s$ , continuously pumped from the secondary settler underflow.

From a modeling point of view, the original BSM1 is based on two widespread accepted process models: the celebrated activated sludge model no. 1 (ASML)<sup>20</sup> used to model the biological process and a nonreactive Takacs one-dimensional layer model for the settling process.<sup>21,22</sup> The full model equations, as well as the kinetic and stoichiometric parameters, are given within the benchmark description.<sup>26</sup> In addition, inflow data are provided in terms of flow rates and ASML state variables over a period of 14 days with 15 min sampling time. All the information required for the proper implementation of the model in virtually any platform can be found at the COST/IWA 624 Web site (<http://www.benchmarkwtp.org/>).

Each reactor is modeled as a perfectly mixed, constant-volume tank within which complex biological reactions give rise to component mass balance equations, generating a system of (coupled) ordinary differential equations. The ASML is a well-established and reliable model widely used among WWTP modelers and further discussion on its known capabilities of reproducing with considerable fidelity the behavior of the reaction section of an activated sludge process can be found in the vast wastewater literature.

**2.1. Settler Model Development.** Unfortunately, the same degree of high reproducibility cannot be attributed to the secondary settler mathematical model because these units display very complex mechanisms that are not still fully understood.<sup>23</sup> Nevertheless, much progress has been made toward building a physically sound model for the secondary settler based on the theory of partial differential equations applied to the conservation law with discontinuous fluxes.<sup>24–27</sup> While these more meaningfully grounded mathematical models satisfying fundamental physical properties<sup>24</sup> still have not found widespread application in the WWTP field, it is commonplace to

resort to approximate models of the settler, and the one due to Vitasovic<sup>22</sup> later used by Takacs<sup>24</sup> is the most widely used representation of the secondary settler in published studies and commercial software environments. Some authors,<sup>25–27</sup> however, pointed out many setbacks related to this model, among which is the fact that the number of discretization layers is not in agreement with numerical convergence and without distinguishing model formulation and numerical solution, but instead it is used solely as a model parameter in order to match experimental observations.<sup>24</sup> In fact, numerical simulations have shown<sup>24</sup> the failure of Takacs's model to represent the complex behavior of secondary settlers under certain conditions, and this has led researchers to switch to more reliable physically meaningful sedimentation models. One such development is described by Diehl,<sup>28</sup> who formulated and analyzed dynamically the settler model based on the one-dimensional scalar mass conservation law, eq 1,

$$\frac{\partial X(z, t)}{\partial t} + \frac{\partial (F(X(z, t), z))}{\partial z} = s(t)\delta(z) \quad (1)$$

where  $X$  is the flocculated solids concentration,  $\delta$  is the Dirac measure,  $s$  is the source, and  $F$  is the flux function, which is discontinuous at three points in the space coordinate  $z$ , namely, at the inlet and the two outlets. Further details are given in the cited references; however it should be emphasized that the model described in Takacs<sup>21,22</sup> is a time discrete version of eq 1 and that the key challenge is the solution method of the partial differential equation described in eq 1.

We here are interested in the sensitivity of the static optimum of the settler coupled with the biological reaction section, and the steady-state solutions of the above equation as given by Diehl<sup>13,19</sup> provide the basis for our analysis. In Table 2 and Figure 2, we partially reproduce the results from ref 18.

Table 2. All the Steady States of the Settler<sup>18</sup>

region in Figure 2	excess flux	$X_c$	$X_b$
$\mathcal{R}_1$	$e < 0$	0	$s/q_s$
$\mathcal{R}_2$	$e < 0$	0	$s/q_s$
$\mathcal{I}_1$	$e < 0$	0	$f(X_c)/q_s$
$\mathcal{I}_2$	$e < 0$	0	$f(X_c)/q_s$
$\mathcal{P}$	$e = 0$	0	$f(X_c)/q_s$
$\mathcal{O}_1$	$e = 0$	0	$f(X_c)/q_s$
$\mathcal{I}_3$	$e = 0$	0	$f(X_c)/q_s$
$\mathcal{O}_2$	$e > 0$	$(s - f(X_c))/q_s$	$f(X_c)/q_s$
$\mathcal{I}_4$	$e > 0$	$(s - f(X_c))/q_s$	$f(X_c)/q_s$
$\mathcal{O}_3$	$e > 0$	$(s - f(X_c))/q_s$	$f(X_c)/q_s$
$\mathcal{O}_4$	$e > 0$	$(s - f(X_c))/q_s$	$f(X_c)/q_s$

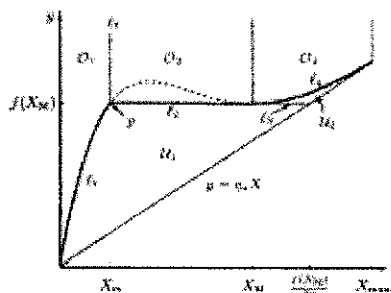


Figure 2. The steady-state chart of the settler.<sup>18</sup>

The development presented next is believed to be new, since no reference thereof has been found in the available literature. A given settler feed condition, represented by the pair  $(X_f, s)$ , where  $s = q_p X_f$  with  $q_p = Q_p/A$  ( $A$  is the cross-sectional area of the settler), can be located anywhere in the 11 regions reported in Table 2. Figure 2 represents those regions and depicts a general flux curve in the thickening zone (i.e., below the feed point), which is given by  $f(X) = Xv_s(X) + q_p X$ . In this expression,  $v_s(X)$  is the settling velocity law, here given by the double exponential eq 2:<sup>23</sup>

$$v_s(X) = \max(0, \min\{v_0, v_0(e^{-r_1(X-X_{min})} - e^{-r_2(X-X_{min})})\}) \quad (2)$$

which contains five parameters that are usually found experimentally:  $v_0$ , the theoretical maximum velocity obtained at the intersection of the  $v_s$  vertical axis and the extension of the right exponential curve;  $v_0'$ , the practical maximum velocity;  $X_{min}$ , the minimum concentration below which the settling velocity vanishes (we here consider  $X_{min}$  is a fraction  $f_m$  of  $X_f$ , that is,  $X_{min} = f_m X_f$ );<sup>24</sup>  $r_1$ , which determines the particle behavior for increasing particle density;  $r_2$  determines the particle behavior at weak concentration values.

Because  $X_f$  and  $s$  are the input variables to the settler, which are primarily functions of the biological activity in the reaction section, the flow rate through the bottom of the settler,  $Q_p$  (or its flux counterpart,  $q_p = Q_p/A$ ), is the sole degree of freedom (manipulated variable) in the settler and can be used as a decision variable for optimization. It is also the sum of the wastage sludge and the outer recycle,  $Q_p = Q_w + Q_r$ , as depicted in Figure 1. From an optimum economic operation point of view, the smaller  $Q_w$ , the smaller is the cost of wastage treatment and, hence, the smaller is the total cost. Because  $Q_r$  is primarily a function of the biological activity in the reaction section, we can presume that minimizing  $Q_p$  via  $Q_w$  reduces the cost of operation of the entire system. Thus, for a given feed  $(X_f, s)$ , we can therefore conclude that optimal operation of the settler lies in the overloaded region, up to the point where one of the first of either  $X^{(eff)}$ , COD<sup>(eff)</sup>, BOD<sup>(eff)</sup>, or TN<sup>(eff)</sup> (which are all functions of the suspended solids in the clarification zone) becomes active, as long as the cost of wastage treatment is positive (since anaerobic digestion of sludge can be indeed lucrative if one considers that the resulting biogas can be commercialized).

From Figure 2, the overloaded region spans four distinct subregions. In regions  $O_1$  and  $O_2$ ,  $X_f$  is small, which may not be the case for activated sludge processes due to the large concentration of suspended solids that is usually formed in the biological reactors. We then focus our analysis on the more

"concentrated" regions  $O_3$  and  $O_4$  in order to determine the constitutive equations of the settler to be used for optimization. The excess flux,  $\epsilon$ , is defined as in eq 3:<sup>25</sup>

$$\epsilon(X_f, s) \equiv s - f_{min}(X_f) \quad (3)$$

where the limiting flux,  $f_{min}(X)$ , is given by eq 4:<sup>26</sup>

$$f_{min}(X) \equiv \min_{X_{min} < X < X_{max}} f(X) = \begin{cases} f(X_M), & X \in (X_m, X_M) \\ f(X), & X \in [X_M, X_{max}] \end{cases} \quad (4)$$

where  $X_M$  is a minimizer of  $f(X)$ ,  $X_m$  is a value strictly less than  $X_M$  satisfying  $f(X_m) = f(X_M)$ , and  $X_{max}$  is the maximum suspended solids concentration. For regions  $O_3$  and  $O_4$ , the excess flux  $\epsilon(X_f, s)$  is then eq 5:

$$\epsilon(X_f, s) = \begin{cases} s - f(X_M), & X_f \in (X_m, X_M) \\ s - f(X_f), & X_f \in [X_M, X_{max}] \end{cases} \quad (5)$$

In any case eq 6 describes an equation for the solid concentration in the effluent  $X^{(eff)}$ , where  $q_e = Q^{(eff)}/A$ ,  $Q^{(eff)}$  being the effluent flow rate:

$$X^{(eff)} = \frac{\epsilon(X_f, s)}{q_e} = \frac{\epsilon(X_f, s)}{q_e - q_u} \Rightarrow q_e = q_f - \frac{\epsilon(X_f, s)}{X^{(eff)}} \quad (6)$$

For region  $O_3$ , eq 7 applies:

$$q_e = q_f - \frac{s - f(X_M)}{X^{(eff)}} \quad (7)$$

and taking  $s = q_p X_f$  and  $f(X_M) = X_M v_s(X_M) + q_p X_M$  into eq 7 gives eq 8:

$$q_e = \frac{X^{(eff)} - X_f}{X^{(eff)} - X_M} q_f + \frac{X_M}{X^{(eff)} - X_M} v_s(X_M) \quad (8)$$

Analogously for region  $O_4$ , with  $f(X_f) = X_f v_s(X_f) + q_p X_f$  eq 9 is found:

$$q_e = q_f + \frac{X_f}{X^{(eff)} - X_f} v_s(X_f) \quad (9)$$

We can reasonably assume that, because  $X_f$  and  $X_M$  are large,  $X_f \gg X^{(eff)}$  and also that  $X_M \gg X^{(eff)}$ . Hence eq 10 applies:

$$q_e \cong \begin{cases} \frac{X_f}{X_M} q_f - v_s(X_M), & X_f \in (X_m, X_M) \\ q_f - v_s(X_f), & X_f \in [X_M, X_{max}] \end{cases} \quad (10)$$

Because the pair  $(X_f, s)$  is primarily dependent on the biological activity in the reaction section, eq 11 holds:

$$\left[ q_f \right]_{X_f \in [X_m, X_{max}]} > \left[ \frac{X_f}{X_M} q_f \right]_{X_f \in (X_m, X_M)} \quad \text{and} \\ \left[ v_s(X_f) \right]_{X_f \in [X_m, X_{max}]} > \left[ v_s(X_M) \right]_{X_f \in (X_m, X_M)} \quad (11)$$

Therefore, the smallest value of  $q_p$ , and hence the minimum wastage disposal cost, is achieved in region  $O_3$  where  $X_f \in (X_m, X_M)$ . Moreover, having  $X_f \in (0, X_m)$  or  $X_f \in (X_M, X_{max})$  depends on the reaction section being able to produce such  $X_f$ , which may not be feasible. This is indeed the case for the activated sludge process considered in this paper as shown later

in the optimization section. However, for large throughputs, that is, high loads during long periods, it may be the case where  $X_T \in (X_M, X_{max})$ , and we have to switch to region  $O_3$  where  $q_3$  is higher.

As a consequence of the previous analysis, the steady-state model of the settler that holds for optimization purposes is given by eq 12,

$$\begin{aligned} X^{(ss)} &= \frac{s - f(X_M)}{q_3} \\ X_s &= \frac{f(X_M)}{q_3} \\ X_M &= M(q_3) \\ X_T &\in (X_m, X_M) \end{aligned} \quad (12)$$

where  $M$  is a function that computes the local minimizer of  $f(X_M)$ . In addition, we can also calculate the steady-state concentration of suspended solids in the clarification ( $X_{ss}$ ) and thickening zones ( $X_m$ ) as in eq 13<sup>38</sup>

$$\begin{aligned} g(X_{ss}) + s &= f(X_M) \\ X_{ss} &= X_M \end{aligned} \quad (13)$$

where  $g(X_{ss}) = X_{ss}v(X_{ss}) - q_b X_{ss}$ .

Note that although in this paper a nonreactive settler is considered, we here follow<sup>37</sup> and treat the dissolved oxygen in the settler in a special way. We assume that the oxygen is consumed within the settler and, as a consequence, the oxygen concentration at the settler's outlets is set to zero, which is indeed a realistic assumption. This results in a more conservative computation of the oxygen demand in the reaction section.

In this paper, the BSM1 protocol<sup>45</sup> with the modified secondary settler model proposed above is reimplemented as a Matlab script, and we use the ADMAT<sup>39</sup> package to compute first-order information based on automatic differentiation for explicit optimization.  $X_M$  is computed implicitly together with the other model equations as the solution of  $df(X)/dX = 0$  with  $d^2f(X)/dX^2 > 0$  as a constrained condition for minimum.

### 3. CONTROLLED VARIABLE SELECTION METHODOLOGY

In this section, a summary of the sensitivity analysis procedure used in this work is discussed. It is not supposed to be an exhaustive discussion on the subject; instead, we give the necessary elements for a proper understanding of the main ideas lying behind the method. Indeed, this plantwide procedure has been successfully applied to other processes as described in various publications in the field.<sup>32-36,37</sup> Indeed, a review of this methodology and others, more heuristics as well as applications thereof can be found in Rangiah and Karwala.<sup>37</sup>

The methodology is mainly based on the first four steps, known as "top-down analysis", of the more general procedure described in Skogestad,<sup>18</sup> where economic variable selection is the key issue. The analysis conducted is of local nature, that is, we use linearized models of the process to develop the methodology. In general, one should always, for a final validation, check the linear results against simulations on the nonlinear model of the process.

In this paper, we use optimal measurement combinations<sup>39</sup> for unconstrained variable selection, that is, the ones left after choosing the active constraints as "primary" economic variables. The basic idea is to select combinations,  $c$ , of the measurements,  $y$ , such that  $c = Hy$ , where  $H$  is a (static) selection matrix. To determine  $H$ , two approaches are developed based on a linearized model of the process and a second-order Taylor series expansion of the cost function used for optimization; two sources of uncertainty are assumed, which are represented by eq 1, external disturbances ( $d$ ), and eq 2, implementation (measurement) errors ( $n$ ). The first of the two approaches combines these uncertainties in one single scaled vector to minimize the worst case economic loss ( $L$ ), defined as the difference between actual operation (with a given control structure in place) and operation under optimal control. In the second approach, we first minimize the loss with respect to external disturbances and then, if there are still available measurements, minimize the loss with respect to implementation (measurement) errors.

Below we give more details on each step of the sensitivity analysis procedure<sup>39</sup> and for that we consider an existing plant and that we have available a steady-state usually nonlinear mathematical model of the process.

1. **Define operational objectives.** We first quantify the operational objectives in terms of a scalar cost function (here denoted  $J$ ), that should be minimized or, equivalently, a scalar profit function,  $P = -J$ , that should be maximized. A typical cost function is given as in eq 14,

$$\begin{aligned} J &= \text{cost of feed} + \text{cost of utilities (e.g., energy)} \\ &\quad - \text{revenue from valuable products} \end{aligned} \quad (14)$$

In addition to the definition of an economic objective, in most cases operation takes place under constrained conditions, such as minimum and maximum values on process variables for process safety, environmental regulations, product specifications, and control limitations. These can be included in the above formulation by defining inequality constraints ( $g \leq 0$ ).

2. **Determine the steady-state optimal operation.** Using a steady-state model of the process, identify degrees of freedom and expected disturbances and perform optimizations to assess sensitivity for the expected disturbances.

Usually, the economics of the plant are primarily determined by the (pseudo) steady-state behavior,<sup>40</sup> so the steady-state degrees of freedom ( $u_0$ ) are usually the same as the economic degrees of freedom. Which variables to include in the set  $u_0$  is immaterial, as long as they make up an independent set. One simple way to identify these degrees of freedom is to use a flowsheet of the process and count the number of independent manipulated variables that can be affected.

The important disturbances ( $d$ ) and their expected range for future operation must then be identified. These are generally related to feed rate and feed composition, as well as external variables such as temperature and pressure of the surroundings. We should also include as disturbances possible changes in specifications and active constraints (such as product specifications or capacity constraints) and changes in parameters (such as equilibrium constants, rate constants, and efficiencies). Finally, we should include as disturbances the expected changes in prices of products, feeds, and energy. Note, however, that some disturbances may have a small effect on the optimal operation of the process. It is therefore desirable to discriminate the important disturbances that should be



considered for steady-state analysis. In this paper, we identify important disturbances to calculate the actual loss in the variable selection step using a nonlinear model of the process.

In order to achieve near-optimal operation without the need to reoptimize the process when disturbances occur, one needs to minimize the loss in eq 15,

$$L = J_0(c, d) - J_0(c^{opt}(d), d) \geq 0 \quad (15)$$

where  $J_0(c, d)$  is the value of the cost for a chosen set of constant set point variables  $c$  that fulfill all remaining degrees of freedom and  $J_0(c^{opt}(d), d)$  is the value of the cost after reoptimization. Clearly, the loss in eq 15 depends on the objective function as well as on the measurements through  $c$ , since  $c$  is a function of the available  $y$ . We then need to learn about the sensitivity to disturbances not only of the cost function but also of the measurements.

To optimize the operation, we select the nominal disturbance  $d$  and vary the values of the degrees of freedom in an optimal way ( $u_0^*(d)$ ) so as to minimize the cost ( $J_0(x, u_0, d)$ ), while satisfying the constraints. Mathematically, this steady-state optimization problem can be formulated as in eq 16,

$$\begin{aligned} & \min_{u_0} J_0(x, u_0, d) \\ & \text{subject to} \\ & \text{model equations } f(x, u_0, d) = 0 \\ & \text{operational constraints } g(x, u_0, d) \leq 0 \end{aligned} \quad (16)$$

where  $x$  are internal variables (states). In  $f(x, u_0, d) = 0$ , possible operational equality constraints (like a given feed flow) are also included. The main objective is to determine the optimal nominal operating condition to be used in the variable selection step.

3. Select "economic" (primary) controlled variables. In this step, the issue is the implementation of the optimal operation point found in the previous step in a robust and, most importantly, simple manner. We need to identify as many economic controlled variables ( $c$ ) as there are economic degrees of freedom ( $u_0$ ). For economic optimal operation, active constraints must be selected,<sup>42</sup> which in turn consumes part ( $u'$ ) of the degrees of freedom. For the remaining degrees of freedom ( $u$ , where  $n_u = n_{u_0} - n_{u'}$ ), we select variables for which close-to-optimal operation is achieved with constant nominal set points, even when there are disturbances.<sup>43</sup> Because our considerations in this paper are of local nature, we assume that the set of active constraints does not change with changing disturbances and we consider the problem in reduced space in terms of the remaining unconstrained degrees of freedom,  $u$ , which can be expressed as in eq 17.<sup>42</sup>

$$\begin{aligned} & \min_u J_0(x, u, d) \\ & \text{subject to} \\ & \text{model equations } f(x, u, d) = 0 \\ & \text{active constraints } g_{active}(x, u, d) = 0 \end{aligned} \quad (17)$$

where we consider as active constraints a subset  $g_{active}(x, u, d)$  of  $g(x, u, d)$  for which optimal values are always at bounds for all disturbances. By elimination of the states using the equality constraints in eq 17, the unconstrained optimization problem can be expressed simply as in eq 18,

$$\min_u J(u, d) \quad (18)$$

Note that although  $J_0$  and  $J$  are numerically the same, they do not share the same mathematical structure. Indeed,  $J$  is generally not a simple function in the variables  $u$  and  $d$  but rather a functional.

Ensuring active constraint operation consumes part of the degrees of freedom for optimization. The remaining degrees of freedom need to be fulfilled, and we select variables such that when kept at optimal set points lead to near-optimal economic operation despite disturbances, that is, the deviation (loss  $L$  in eq 15) from reoptimization as a function of disturbances should be small. The optimal set points of  $c$  are then determined from the optimization at the nominal operating point. This is the celebrated self-optimizing control technology.<sup>44</sup> A quantitative way to determine the set  $c$  is based on a quadratic approximation of the cost function  $J$  as given by eq 18. It can be shown<sup>39</sup> that the second-order accurate expansion of the loss function is given by eq 19,

$$L = \frac{1}{2}(u - u^{opt})^T J_{uu}(u - u^{opt}) = \frac{1}{2} z^T z = \frac{1}{2} \|z\|_2^2 \quad (19)$$

with  $z = J_{uu}^{-1/2}(u - u^{opt})$ , where  $J_{uu} = (d^2 J / du^2)_{u=u^{opt}}$  is the Hessian of  $J$  with respect to  $u$  evaluated at  $u^{opt}$ , and  $u^{opt}$  is the optimal value of the manipulated variables. We consider that  $c$  is expressed as a linear combination of the available measurements  $y$  as in eq 20,

$$c = Hy \quad (20)$$

where  $H$  is a real constant matrix, the coefficient matrix, and  $\dim(c) = \dim(u)$ .

Now, assume we have a linearized (local) model of the process in terms of deviation variables as in eq 21,

$$y = \underbrace{\begin{bmatrix} G^u & G^d \end{bmatrix}}_{G} \begin{bmatrix} u \\ d \end{bmatrix} \quad (21)$$

It can then be shown<sup>39</sup> that  $z$  can be expressed as function of the more appropriate uncertainty variables, eq 22,

$$z = \underbrace{\begin{bmatrix} M_d & M_{u'} \end{bmatrix}}_{M} \begin{bmatrix} d' \\ u' \end{bmatrix} \quad (22)$$

where  $d'$  and  $u'$  are the scaled disturbance and measurement error variables related by  $d = W_d d'$  and  $u' = W_{u'} u'$  ( $W_d$  and  $W_{u'}$  are scaling matrices), and  $M_d$  and  $M_{u'}$  are given by eqs 23 and 24, respectively

$$M_d = -M_u H F W_d \quad (23)$$

$$M_{u'} = -M_u H W_{u'} \quad (24)$$

where

$$M_u = J_{uu}^{-1/2} (H G^u)^{-1} \quad (25)$$

and  $F = dy^{opt} / dd$  is the optimal measurement ( $y^{opt}$ ) sensitivity with respect to the disturbances, which can be found explicitly by eq 26,<sup>39</sup>

$$F = -(G^u J_{uu}^{-1} J_{ud} - G^d) \quad (26)$$

where  $J_{ud} = [d^2 J / (du dd)]_{u=u^{opt}}$ .

Therefore, we choose to compute the worst-case loss ( $L_{wc}$ ) for the expected disturbances and measurement noise as given by eq 27,<sup>45</sup>

$$L_{\min} = \max_{\substack{\|d\| \\ \|e\| \leq 1}} L = \frac{1}{2} \bar{\sigma}^2(M) \quad (27)$$

In other words, we need to find  $H$  that minimizes  $\bar{\sigma}(M)$ , that is,  $H = \arg \min_H \bar{\sigma}(M)$ . There are basically two approaches to solve for this minimization problem.

The first approach solves the minimization problem in eq 27 at once by combining disturbances and measurement errors in one vector, and in this case, an explicit formula for  $H$  is given by eq 28.<sup>39</sup>

$$H^T = (\bar{F}\bar{F}^T)^{-1} G^T (G^T (\bar{F}\bar{F}^T)^{-1} G^T)^{-1/2} \quad (28)$$

where  $\bar{F} = [FW_e W_e^T]$  and  $\bar{F}\bar{F}^T$  must be full rank. This expression applies to any number  $n_y$  of measurements.

The second approach, called the extended nullspace method,<sup>39</sup> solves the minimization problem in eq 27 in two steps: first minimizing the loss with respect to disturbances and then, if there are still enough measurements left, minimizing the loss with respect to measurement errors. One justification for this methodology is that disturbances are the reason for introducing optimization and feedback in the first place. Another reason is that it may be easier later to reduce measurements errors than to reduce disturbances. It can be shown that the explicit expression for  $H$  in this case is given by eq 29.<sup>39</sup>

$$H = M_x^{-1} J (W_e^{-1} G^T)^T W_e^{-1} \quad (29)$$

where  $J = [J_m^{1/2} J_m^{1/2} J_m^{-1} J_m]$ . There are four cases where eq 29 can be applied:

Case 1. "Just-enough" measurements are chosen, that is,  $n_y = n_x + n_d$ . Here, the expression for  $H$  becomes eq 30.

$$H = M_x^{-1} J (G^T)^T \quad (30)$$

which is the same as having  $H$  in the left null space of  $F$ , that is,  $H \in N(F^T)$ .

Case 2. Extra measurements (select just enough measurements) are also included, that is,  $n_y > n_x + n_d$ , and we want to select a subset of the measurements  $y$  such that  $n_y = n_x + n_d$ . The solution is to find such a subset that maximizes  $\sigma(G^T)$  using, for example, existing efficient branch-and-bound algorithms.<sup>43</sup> The resulting  $\bar{G}^T$  is then used to compute  $H$  in eq 30.

Case 3. Extra measurements (use all available measurements), that is,  $n_y > n_x + n_d$ .  $H$  is calculated using eq 29, where  $\dagger$  denotes the left inverse, calculated as  $A^\dagger = (A^T A)^{-1} A^T$  for any given matrix  $A$ .

Case 4. "Too few" measurements are available, that is,  $n_y < n_x + n_d$ . In this case, the optimal  $H$  in eq 29 is not affected by the noise weight and therefore becomes

$$H = M_x^{-1} J (G^T)^\dagger \quad (31)$$

where  $\dagger$  denotes the right inverse, that is,  $A^\dagger = A^T (AA^T)^{-1}$ .

The above procedure boils down to selecting suitable candidate measurements, that is, identify  $n_y$  vis-a-vis  $n_x + n_d$  and find that linear combination (matrix  $H$ ) of all, or a given subset of measurements, which results in the smallest loss among every possible solution. One big hurdle to be surmounted is the numerical calculation of  $J_m$  and  $J_m^\dagger$ . For some ill-posed problems, it may become an intractable task, and one solution is to compute  $F$  numerically instead, since  $F =$

$dy^T/dx$ . Hopefully, the extended nullspace general formula, eq 29, can, after some matrix algebra, be reformulated as in 32.

$$H = M_x (G^T)^\dagger [G^T (G_x^T - F)] (W_e^{-1} G^T) W_e^{-1} \quad (32)$$

where  $M_x = (J_m^{-1/2})^T M_x$  can be any nonsingular  $n_x \times n_x$  matrix. In this case, we could select  $M_x = J_m^{-1/2}$  so that eqs 28 and 29 are independent of Hessian information.

It should be clear that the linear method just described is local in nature, so only small variations around the optimal values can be considered. Many large disturbances will certainly move the operating conditions significantly, and only a nonlinear model of the process could represent such a case.

## 4. RESULTS

In this section, we focus on the application of the aforementioned procedure to the mathematical model described in section 2, starting with the definition of optimal operation. It is worth mentioning that a nonlinear steady-state model of the process is the main requirement and that the analysis is based on steady-state considerations only.

**4.1. Step 1. Operational Objectives.** The operational costs in a wastewater treatment plant depend on the wastewater system itself and can be divided into manpower, energy, maintenance, chemical usage, chemical sludge treatment, and disposal costs. However, in this work, the objective is to reduce the cost of energy and sludge disposal as much as possible. Therefore, the following costs are considered: required pumping energy,  $E_p$ , expressed in kWh/d; required aeration energy,  $E_a$ , expressed in kWh/d; required mixing energy when aeration need is too low to provide adequate mixing,  $E_M$ , expressed in kWh/d; sludge disposal,  $C_D$ , expressed in  $\$/d$ .

To express the partial costs over a certain range of time,  $\Theta$ , we adopt the expressions proposed in Alex et al.<sup>11</sup> The total energy due to the required pumping energy depends directly on the recycle flow ( $Q_r$ ), on the internal recycle ( $Q_i$ ), and on the waste sludge flow rate ( $Q_w$ ) through eq 33:

$$E_p = \frac{1}{\Theta} \int_{t_0}^{t_0+\Theta} (0.004Q_r(t) + 0.008Q_i(t) + 0.05Q_w(t)) dt \quad [\text{kWh/d}] \quad (33)$$

with the flow rates in  $m^3/d$ . The aeration energy can be calculated from eq 34, which is a function of the oxygen saturation concentration,  $S_0^*$ , in each bioreactor volume,  $V$ , and  $K_{1,a}$ , the combined mass transfer coefficient for oxygen:

$$E_a = \frac{S_0^*}{\Theta \times 1.8 \times 1000} \int_{t_0}^{t_0+\Theta} \sum_{i=1}^n V_i K_{1,a}^{(i)}(t) dt, \quad n = 5 \quad [\text{kWh/d}] \quad (34)$$

with  $K_{1,a}$  expressed in  $d^{-1}$  and  $i$  referring to the reactor zone number. In addition to aeration, mechanical mixing might also be supplied to avoid settling. The mixing energy is then a function of the compartment volume and can be computed by eq 35:

$$E_M = \frac{24}{\Theta} \int_{t_0}^{t_0+\Theta} \sum_{i=1}^n \begin{cases} 0.005V_i dt, & \text{if } K_{1,a}^{(i)}(t) < 20 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad [\text{kWh/d}] \quad (35)$$

The sludge disposal production per day is expressed as in eq 36

$$C_D = \frac{1}{\Theta} \int_{t_0}^{t_0+\Theta} (\text{TSS}_w(t) Q_w(t)) dt \quad [\text{gSS/d}] \quad (36)$$

where  $\text{TSS}_w$  represents the total suspended solids wasted with  $Q_w$ . Assuming a constant energy price,  $k_E = \$0.09/\text{kWh}$ , and a sludge disposal cost of  $k_D = \$80/\text{ton}$ , the total cost in  $\$/\text{d}$  can be calculated as in eq 37:

$$\text{cost} = k_E(E_P + E_A + E_M) + k_D C_D \quad [\$/\text{d}] \quad (37)$$

The overall cost function in eq 37 is then averaged over time for steady-state purposes and minimized subject to environmental regulations for the effluent and some constraints related to process operability. These constraints are listed in Table 3.

Table 3. Constraints to the Process

constraint	unit	status
$\text{COD}^{\text{eff}} \leq 100$	$\text{gCOD/m}^3$	regulation constraint
$\text{TSS}^{\text{eff}} \leq 30$	$\text{gSS/m}^3$	regulation constraint
$\text{TN}^{\text{eff}} \leq 18$	$\text{gN/m}^3$	regulation constraint
$\text{BOD}_5^{\text{eff}} \leq 10$	$\text{gBOD/m}^3$	regulation constraint
$S_{\text{NH}}^{\text{eff}} \leq 4$	$\text{gN/m}^3$	regulation constraint
$Q_e \leq 1845$	$\text{m}^3/\text{d}$	manipulation constraint
$Q_i \leq 36892$	$\text{m}^3/\text{d}$	manipulation constraint
$Q_r \leq 92230$	$\text{m}^3/\text{d}$	manipulation constraint
$K_L a^{\text{eff}} \leq 360$	$\text{d}^{-1}$	manipulation constraint

The effluent environmental regulation constraints on COD, TSS, TN,  $\text{BOD}_5$ , and  $S_{\text{NH}}$ , and the values for the manipulation constraints are taken from Alex et al.<sup>15</sup>

**4.2. Step 2. Steady-State Optimal Operation.** Using the information given in the process flowsheet in Figure 1, we find

that there are eight manipulated variables that correspond to eight steady-state degrees of freedom ( $u$ ), namely,  $Q_w$  (excess sludge flow rate),  $Q_e$  (external recirculation flow rate),  $Q_r$  (internal recirculation flow rate), and  $K_L a^{i-1}$  (mass transfer coefficient of oxygen in each basin). These are the last four entries in Table 3. The liquid levels in the reactor tanks are assumed to be constant at maximum capacity due to the overflow layout considered for the plant. Note that from the 11 valves in Figure 1, the feed valve is not an available degree of freedom since it is a disturbance to the process; the valve at the outlet of the last basin is only used to possibly adjust this basin level; and the valve at the effluent line has indeed no steady-state effect.

**4.2.1. Remark 1.** We here consider  $K_L a$  as a manipulated variable to avoid including details of basin and aeration systems geometry into the model because the actual manipulated variable, namely, the flow of compressed air, is generally a function of the type  $q_{\text{air}} = F(K_L a, d_b, h, L_s, f, B, \alpha, \gamma, \nu, A, D)$ , where  $d_b$  is the diameter of bubbles,  $h$  is the submergence of aerators,  $L_s$  is the liquid depth in the aeration basin,  $f$  is the width of the aeration band,  $B$  is the width of the aeration basin,  $\alpha$  is the correction factor relating the overall mass-transfer coefficient ( $K_L a$ ) of the wastewater to that of tap water,  $\gamma$  is the temperature correction factor,  $\nu$  is the water viscosity,  $A$  is the sectional area of the basin, and  $D$  is the coefficient of molecular diffusion. One such relation given in Khudenko and Shpirt<sup>44</sup> is reproduced in eq 38.

$$K_L a = 0.041 a \gamma \left( \frac{h}{d_b} \right)^{0.67} \left( \frac{f}{B} \right)^{0.18} \left( \frac{q_{\text{air}}}{L_s A} \right) \quad (38)$$

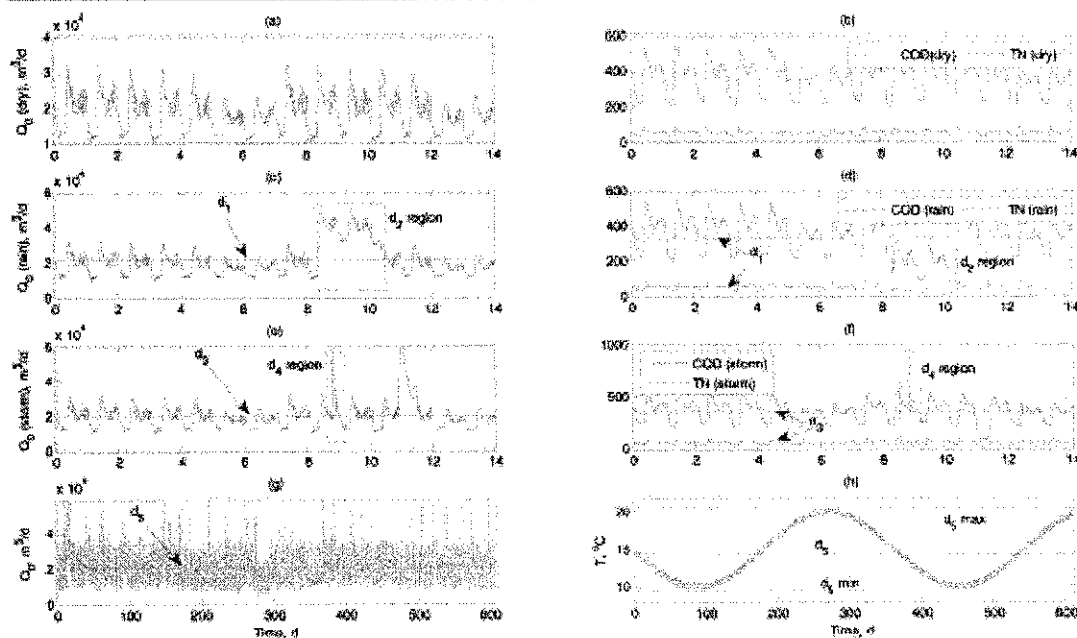


Figure 3. Influent flow rate and organic and nutrient compounds for the given weather events and long term data<sup>1</sup> (the considered steady-state optimization disturbances are highlighted).

Since our unconstrained variable selection analysis is local (linear) in nature, we here choose as disturbances for this purpose the most important inputs in the influent,<sup>15</sup> which are the flow rate,  $Q^{(in)}$ , the chemical oxygen demand, COD<sup>o</sup>, the total suspended solids concentration, TSS<sup>o</sup>, the total nitrogen concentration, TN<sup>o</sup>, and the surrounding temperature,  $T$ . Obviously, each of these are considered acting upon the process one at the time.

On the other hand, for nonlinear loss evaluation, we must define more realistic disturbance scenarios. Compared with other process industries, a wastewater treatment plant is subject to very distinct operation modes because of daily, weekly, and seasonal variation in the incoming wastewater. In this paper, we consider the influent load data as given by the IWA Task Group in the benchmark Web site. The data are presented in terms of ASMI state variables and influent flow rates. In general, these data reflect expected diurnal trend variations in weekdays, which are typical for normal load behavior at a municipality treatment facility. Four different weather/influent conditions are considered in four different data sets and from those, different events are deduced for our purposes: (1) The dry weather file (Figure 3a,b) gives what is considered to be normal diurnal variations in flow and organic pollutant loads. In the following, the average input compositions and flow rate are considered as nominal conditions for the BSM1 plant. (2) The rain weather file (Figure 3c,d) represents a long rain event. (3) The storm weather file (Figure 3e,f) is a variation of the dry weather file incorporating storms. The first storm event in this file is of high intensity and short duration. The second storm event assumes the sewers were cleared of particulate matter during the first storm event; hence, only a modest increase in COD load is noted during the second storm. (4) The long-term weather file (Figure 3g,h) represents 1.5 year data where the first 6 months, starting in winter time, give training data and the last 12 months, starting in summer time, correspond to the monitoring period. Variation in temperature during one year time are also considered. This overcomes one of the recognized limitations<sup>45</sup> of the BSM1 model: the availability of short time data sequences, which in turn results in a long-term benchmark model no. 1 (BSM1\_LT). It focuses on long-term process performances and considers temperature variations during one year.

As step change disturbances from the nominal operation for steady state optimizations, we consider different conditions from the different data sets. Starting from the nominal conditions (Figure 3a,b), average values of influent during dry weather, Table 4 summarizes the given disturbances to be used

Table 4. Weather Profiles Events and Derived Disturbances

	$Q^{(in)}$ (m <sup>3</sup> /d)	COD <sup>o</sup> (gCOD/m <sup>3</sup> )	TSS <sup>o</sup> (gSS/m <sup>3</sup> )	TN <sup>o</sup> (gN/m <sup>3</sup> )	$T$ (°C)
$d_0$ (nominal)	18446	383	211	54	15
$d_1$	11320	333	183	48	15
$d_2$	40817	204	116	28	15
$d_3$	17746	333	195	50	15
$d_4$	34286	281	101	37	15
$d_5$	10850	347	199	41	15
$d_{min}$	20850	347	199	41	9
$d_{max}$	20850	347	199	41	21
expected range					
max( $d_1$ - $d_{min}$ ), 1	22371	100	110	26	6
$d_6 = d_{max}$ (1)					

for nonlinear computations in terms of influent flow rate and load. The average composition and flow rate,  $d_0$ , and the average values for the process inputs during the rain period, marked as  $d_2$  region, are taken from the rain weather depicted in Figure 3c,d. From Figure 3e,f, we can identify the given disturbance as  $d_3$  representing the average condition during the whole period and  $d_4$  as the average during the storm time. Variations in temperature during one year time are reported in Figure 3g,h, and we consider the average ( $d_5$ ), minimum ( $d_{min}$ ) and maximum ( $d_{max}$ ) values for the temperature. In fact, one particular advantage of studying this process is the availability of the weather event profiles for different weather conditions (as well as the long-term data) because it definitely aids the sensitivity analysis with the actual upsets to the plant. The importance of this sort of discrimination is well documented in Gernaey et al.<sup>46</sup>

To achieve optimal operation, we select the active constraints as variables to be monitored,<sup>41</sup> whereas the difficult issue of deciding which unconstrained variables to select is resolved by recurring to the concepts of step 3 of the procedure described in the preceding section. The starting point for the selection of primary (economic) variables is the optimization of the process. To this end, the BSM1 model plus the proposed model of the secondary settler is reimplemented as a script in MatLab and the nominal optimization is performed subjected to the constraints given in Table 3. The in-built MatLab subroutine "fmincon.m" is the optimizer of choice, and in order to make the optimization run more robustly, we used an automatic differentiation software<sup>47</sup> to compute first-order (sparse) information, that is, Jacobians and gradients.

**4.3. Step 3. Controlled Variable Selection.** The results of the optimization can be seen in Table 5, which gives the values of relevant variables involved in the process. Three constraints are active, namely, TSS<sup>(out)</sup> (upper limit),  $S_{NH_4}^{(out)}$  (upper limit), and  $Q_2$  (lower limit). As expected (see discussion in section 2), TSS<sup>(out)</sup> is at its maximum to make  $Q_2$  small. In general, the reason free ammonia ( $S_{NH_4}^{(out)}$ ) is active at its upper bound is that because nitrification is an oxygen-demanding process and because the transfer efficiency of oxygen from gas to liquid is relatively low so that only a small amount of oxygen supplied is used by the microorganisms, the aeration demand ( $E_A$ ), which is the major cost contributor in a wastewater treatment plant, is high. The fact that  $Q_2 = 0$  is somehow surprising. However, from a practical point of view,  $Q_2 = 0$  is possible. In fact, the internal recirculation is needed in the pre-denitrification configuration of the activated sludge process as carbon source (in this way, no external carbon source, like methanol, is added into anoxic zones) and to enhance denitrification in the system. In our case, the return sludge from the secondary settler returns quite sufficient organic matter and nitrate for denitrification; for this reason,  $Q_2$  might be avoided in a more economically convenient way. The optimization results show that at the given steady-state conditions the original pre-denitrification configuration could be beneficially replaced by a different configuration with lower oxygen concentration profile along the bioreactor. Of course,  $Q_2$  would be certainly needed dynamically together with higher dissolved oxygen concentrations to enhance the capabilities of the control system in terms of reductions of the effluent peaks and disturbance rejection as long as some reset is programmed to always send it back to its steady-state optimal values, that is,  $Q_2 = 0$ . Another interesting fact is that the process is optimally operated aerobically, that is to say, with no anoxic zone. The

Table 5. Effect of Disturbances on Optimal Values of Selected Variables in the System

variable	unit	nominal <sup>a</sup>	optimal <sup>b</sup>	units	measurement stage	measurement noise
cost	\$/d	428.394	460.641			
$E_p$	\$/d	17.465	20.278			
$E_A$	\$/d	250.815	239.612			
$E_{ar}$	\$/d	0.000	21.600			
$C_m$	\$/d	160.114	159.151			
$S_{O_1}^{(1)}$	gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup>	0.1	0.0	measurement #1	0–10	0.250
$S_{O_2}^{(1)}$	gN/m <sup>3</sup>	1.4	0.2	measurement #2	0–20	0.500
$S_{O_3}^{(1)}$	gN/m <sup>3</sup>	14.9	16.1	measurement #3	0–50	1.250
$S_{O_4}^{(1)}$	gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup>	0.2	0.0	measurement #4	0–10	0.250
$S_{O_5}^{(1)}$	gN/m <sup>3</sup>	2.4	0.0	measurement #5	0–20	0.500
$S_{O_6}^{(1)}$	gN/m <sup>3</sup>	12.5	16.8	measurement #6	0–50	1.250
$S_{O_7}^{(1)}$	gN/m <sup>3</sup>	0.2	0.3	measurement #7	0–10	0.250
$S_{O_8}^{(1)}$	gN/m <sup>3</sup>	3.4	2.5	measurement #8	0–20	0.500
$S_{O_9}^{(1)}$	gN/m <sup>3</sup>	9.6	11.7	measurement #9	0–50	1.250
$S_{O_{10}}^{(1)}$	gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup>	0.2	0.3	measurement #10	0–10	0.250
$S_{O_{11}}^{(1)}$	gN/m <sup>3</sup>	4.8	5.0	measurement #11	0–20	0.500
$S_{O_{12}}^{(1)}$	gN/m <sup>3</sup>	6.7	7.6	measurement #12	0–50	1.250
$S_{O_{13}}^{(1)}$	gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup>	0.2	0.3	measurement #13	0–10	0.250
$S_{O_{14}}^{(1)}$	gN/m <sup>3</sup>	6.2	7.7	measurement #14	0–20	0.500
$S_{O_{15}}^{(1)}$	gN/m <sup>3</sup>	4.0	4.6			
TSS	gSS/m <sup>3</sup>	5856.5	5983.8	measurement #15	0–10000	250.000
SRT	d	13.83	14.20			
FM	gCOD/gSS/d	0.2	0.2			
COD <sup>(a)</sup>	gCOD/m <sup>3</sup>	67.0	67.3			
TSS <sup>(a)</sup>	gSS/m <sup>3</sup>	30.0	30.0			
TN <sup>(a)</sup>	gN/m <sup>3</sup>	13.3	15.0			
$S_{O_1}^{(2)}$	gN/m <sup>3</sup>	4.0	4.6			
BOD5 <sup>(a)</sup>	gBOD <sub>5</sub> /m <sup>3</sup>	4.6	4.7			
TSS <sup>(a)</sup>	gSS/m <sup>3</sup>	10458.0	10238.0	measurement #16	0–10000	250.000
$S_{O_2}^{(2)}$	gN/m <sup>3</sup>	6.1	7.7			
$Q_{in}$	m <sup>3</sup> /d	191.4	194.3	measurement #17	0–100000	1500.000
$Q_{out}$	m <sup>3</sup> /d	22922.0	26349.2	measurement #18	0–100000	1500.000
$Q_{in}^{(2)}$	m <sup>3</sup> /d	0.0	3199.9			
$Q_{in}^{(2)}$	m <sup>3</sup> /d	0.01	0.01			
$Q_{in}^{(2)}$	m <sup>3</sup> /d	1.24	1.37			
$K_1 d^{(1)}$	d <sup>-1</sup>	122.77	0.00	measurement #19 <sup>b</sup>	0–360	9.000
$K_1 d^{(2)}$	d <sup>-1</sup>	123.03	0.00	measurement #20 <sup>b</sup>	0–360	9.000
$K_2 d^{(1)}$	d <sup>-1</sup>	100.44	184.33	measurement #21 <sup>b</sup>	0–360	9.000
$K_2 d^{(2)}$	d <sup>-1</sup>	97.18	159.98	measurement #22 <sup>b</sup>	0–360	9.000
$K_3 d^{(1)}$	d <sup>-1</sup>	88.28	142.67	measurement #23 <sup>b</sup>	0–360	9.000
$Q^{(a)}$	m <sup>3</sup> /d	18446.0	18446.0	measurement #24	0–100000	2500.000
$S_{NH_4}^{(a)}$	gN/m <sup>3</sup>	31.6	31.6	measurement #25	0–50	1.250
COD <sup>(a)</sup>	gCOD/m <sup>3</sup>	381.2	381.2	measurement #26	0–1000	25.000
TSS <sup>(a)</sup>	gSS/m <sup>3</sup>	211.3	211.3	measurement #27	0–10000	250.000
TN <sup>(a)</sup>	gN/m <sup>3</sup>	54.4	54.4			
$\tau^{(a)}$	°C	15.0	15.0	measurement #28	5–25	0.825

<sup>a</sup>We here assume that measurement accuracy for concentration is 15% of the range. For the other measurements, the accuracy is given by the range of the measurement noise. <sup>b</sup>These measurements can be inferred from, for example, eq 38.

possible reason is due to the attempt to minimize the high aeration costs, and to the fact that the effluent total nitrogen and ammonia constraints are quite easily attained for the given influent loads. Optimization of the process assuming the original configuration of the BSM1 model where the first two tanks are operated anoxically, that is, with  $K_{1a}^{(1)} = K_{1a}^{(2)} = 0$ , was also conducted (see column dubbed "original" in Table 5), resulting in a higher cost of operation.

It is worth notice at this point that since the settler is modeled as a nonreactive process, the ammonia concentration in the effluent matches, at least at steady-state, the one in the

last aerobic tank, and this also applies for all other soluble components. In practice, however, there is an anoxic condition in the settler that favors denitrification with an improved final total nitrogen of about 15% smaller compared with the nonreactive model assumed in this paper.<sup>46</sup>

Because these three active constraints must be implemented to ensure optimal operation,<sup>47</sup> we are left with five degrees of freedom, and we use the local methods described in step 3 of the procedure to decide for the best (optimal) set of unconstrained self-optimizing control variables to fulfill the available degrees of freedom. We consider the measurements

Table 6. Nonlinear loss calculation for various disturbances

	unit	$d_1$	$d_2$	$d_3$	$d_4$	$d_5$	$d_{COD}$	$d_{NH_4}$
Cost <sup>H<sub>1</sub></sup>	\$/d	426.783	490.066	420.555	599.359	419.829	491.283	357.965
Cost <sup>H<sub>2</sub></sup>	\$/d	427.088	507.184	420.615	602.525	420.361	494.371	Inf
Loss <sup>H<sub>1</sub></sup>	%	0.072	3.489	0.014	0.528	0.127	0.629	Inf
Cost <sup>H<sub>3</sub></sup>	\$/d	427.067	Inf	420.601	Inf	419.937	507.757	359.481
Loss <sup>H<sub>3</sub></sup>	%	0.067	Inf	0.011	Inf	0.026	3.549	0.004
Cost <sup>H<sub>4</sub></sup>	\$/d	426.970	493.850	420.597	608.948	420.368	492.817	358.711
Loss <sup>H<sub>4</sub></sup>	%	0.044	1.178	0.010	1.600	0.128	0.312	0.211

indicated as such in Table 5, which according to Alex et al.<sup>15</sup> are readily available for the process. Moreover, the range and noise level for each measurement variable are also provided,<sup>15</sup> where the measurement noise corresponds to 0.25% of the maximum value of the measurement interval. Overall, there are  $n_y = 28$  measurements,  $n_u = 5$  manipulated variables, and  $n_d = 5$  disturbances, and clearly with  $n_y > n_u + n_d$  one can expect to substantially reduce the loss for both disturbances and measurement errors.

Because there are as many measurements as there are manipulated variables and disturbances, one can compute various H matrices. The methods considered in this paper are (1) the combined disturbances and measurement errors using all available measurements, where H is computed by eq 28, in which case, H<sub>1</sub> is a 5 × 28 combination matrix, (2) the extended nullspace using all measurements with H computed by eq 32, in which case, H<sub>2</sub> is also a 5 × 28 combination matrix, and (3) the extended nullspace using just enough measurements, where  $\tilde{G}$  in eq 32 is found by a branch and bound algorithm,<sup>23</sup> in which case, H<sub>3</sub> is a 5 × 10 combination matrix.

Note that we here normalize the magnitude of the elements in each matrix H such that  $\|H\|_F = 1$ , where  $\|\cdot\|_F$  is the Frobenius norm.

**4.3.1. Remark 2: Ranking of the Losses.** The losses as computed by eq 27 must satisfy  $L_{min}^{H_1} < L_{min}^{H_2} < L_{min}^{H_3}$  since one of the options for H<sub>1</sub> is to use only the measurements selected by H<sub>3</sub>, hence  $L_{min}^{H_1} < L_{min}^{H_3}$ . In addition,  $L_{min}^{H_2} < L_{min}^{H_3}$  because the computation of H<sub>2</sub> includes both disturbances and measurement errors simultaneously. Finally, because H<sub>2</sub> uses all measurements, the resulting loss for H<sub>2</sub> must be larger than that for H<sub>3</sub>, that is  $L_{min}^{H_2} < L_{min}^{H_3}$ .

**4.3.2. Remark 3: Scaling of H before Computing the Loss.** Scaling of H does not change the loss as given in eq 27, with M<sub>2</sub> computed via eq 25 with second-order information (J<sub>xx</sub>) available, since

$$\begin{aligned} M &= -J_{xx}^{-1/2} \left( \frac{H}{\|H\|} - G^* \right)^{-1} \frac{H}{\|H\|} [FW_2 W_2^T] \\ &= -J_{xx}^{-1/2} (HG^*)^{-1} H [FW_2 W_2^T] \\ &= [M_2 M_2^T] \end{aligned} \quad (18)$$

The above derivations are local in nature since we have assumed a linear process model and a second-order Taylor series expansion of the objective function in the inputs and the disturbances. Thus, the proposed controlled variables are only globally optimal for the case with a linear model and a quadratic objective. However, in this Article, for a final validation, the sensitivity of the proposed control structure at steady state through the actual losses is checked using the nonlinear model of the process as given in Table 6. This table shows that the losses are about the same order of magnitude for a given

disturbance. Although  $L_{min}^{H_2} < L_{min}^{H_1} < L_{min}^{H_3}$  is true in a linear fashion, the extended nullspace method, like any other local method, does not guarantee that the rank of linear and nonlinear losses, that is, those calculated from the nonlinear model of the process, is the same.

Also from Table 6, we can see that feasibility is not always guaranteed, and indeed only the alternative where H was computed using the extended nullspace method with "just-enough" measurements is feasible for all disturbance spectra. In this particular case, the variables (to be combined) chosen by the branch-and-bound algorithm that maximized the minimum singular value of  $\tilde{G}$  were  $y = [S_0^{(3)} S_0^{(4)} S_0^{(5)}]$ , MLSS  $K_1 a^{(1)}$ ,  $K_1 a^{(2)}$ ,  $K_1 a^{(3)}$ ,  $K_1 a^{(4)}$ , COD<sup>(in)</sup>,  $T^{(in)}$ , and their respective linear combinations are given by eq 40

$$\begin{aligned} c_1 &= (5.91570)S_0^{(3)} + (-3.05028)S_0^{(4)} + (2.15592)S_0^{(5)} \\ &\quad + (-3.80985)MLSS + (-5.75283)K_1 a^{(1)} + (3.35123)K_1 \\ &\quad a^{(2)} + (3.42391)K_1 a^{(3)} + (3.39584)K_1 a^{(4)} \\ &\quad + (52.61097)COD^{(in)} + (-1.40483)T^{(in)} \\ c_2 &= (2.93476)S_0^{(3)} + (-0.52902)S_0^{(4)} + (5.35700)S_0^{(5)} \\ &\quad + (11.63321)MLSS + (0.45551)K_1 a^{(1)} + (1.28712)K_1 a^{(2)} \\ &\quad + (1.31741)K_1 a^{(3)} + (1.32573)K_1 a^{(4)} + (-209.25538) \\ &\quad COD^{(in)} + (3.21371)T^{(in)} \\ c_3 &= (-0.74280)S_0^{(3)} + (0.57466)S_0^{(4)} + (0.28840)S_0^{(5)} \\ &\quad + (2.44229)MLSS + (0.02816)K_1 a^{(1)} + (2.15399)K_1 a^{(2)} \\ &\quad + (-1.37556)K_1 a^{(3)} + (-1.36647)K_1 a^{(4)} \\ &\quad + (-26.47753)COD^{(in)} + (1.25175)T^{(in)} \\ c_4 &= (-2.88048)S_0^{(3)} + (1.06803)S_0^{(4)} + (-2.96165)S_0^{(5)} \\ &\quad + (-4.10911)MLSS + (1.95871)K_1 a^{(1)} + (-2.71534)K_1 \\ &\quad a^{(2)} + (0.77048)K_1 a^{(3)} + (-2.74441)K_1 a^{(4)} \\ &\quad + (73.52450)COD^{(in)} + (-0.27567)T^{(in)} \\ c_5 &= (-2.99251)S_0^{(3)} + (1.04006)S_0^{(4)} + (-2.97401)S_0^{(5)} \\ &\quad + (-4.24283)MLSS + (1.98108)K_1 a^{(1)} + (-2.58617)K_1 \\ &\quad a^{(2)} + (-2.92184)K_1 a^{(3)} + (0.59870)K_1 a^{(4)} \\ &\quad + (69.65180)COD^{(in)} + (-0.05839)T^{(in)} \end{aligned} \quad (40)$$

In the above expressions, the matrix H is scaled with respect to the measurements such that the new matrix H<sub>2</sub> = HD<sub>y</sub>, where D<sub>y</sub> = diag[span(y)] and span(y) is given as the measurement range in Table 5. Note that the measurements that most affect the selected controlled variables are related to the COD at the plant inlet. The most sensitive variable to measurement change is c<sub>1</sub> as  $\|H_2(2, \cdot)\|_2 = 210$ , and c<sub>5</sub> is the less sensitive one with  $\|H_2(5, \cdot)\|_2 = 27$ . All in all, not much physical information can be inferred from the above expressions since the extend nullspace method is purely mathematical in nature.

Table 7. Optimal Constraint Values for the Set of Disturbances in Table 4

constraint	unit	nominal	$d_1$	$d_2$	$d_3$	$d_4$	$d_{\text{nom}}$	$d_{\text{max}}$
$\text{COD}^{(s)} < 125$	gCOD/m <sup>3</sup>	67.0	64.6	517	66.1	66.6	64.7	66.7
$\text{TSS}^{(s)} < 30$	gSS/m <sup>3</sup>	30.0	30.0	300	30.0	30.0	30.0	30.0
$\text{TN}^{(s)} < 18$	gN/m <sup>3</sup>	13.3	13.0	127	12.8	14.8	10.3	15.8
$S_{\text{NH}_4}^{(s)} < 10$	gN/m <sup>3</sup>	4.0	4.0	40	4.0	4.0	4.0	4.0
$\text{BOD}_5^{(s)} < 10$	gBOD/m <sup>3</sup>	4.6	4.8	5.3	4.7	5.3	4.8	4.2
$Q_a < 1644.6$	m <sup>3</sup> /d	191.4	189.0	2409	183.7	342.0	208.1	262.3
$K_{1,d}^{(1)} < 360$	d <sup>-1</sup>	122.8	117.7	837	123.6	67.8	1455	51.5
$K_{2,d}^{(2)} < 360$	d <sup>-1</sup>	123.0	124.4	1358	122.2	160.7	111.5	124.2
$K_{3,d}^{(3)} < 360$	d <sup>-1</sup>	160.4	162.6	1247	99.8	148.9	91.7	110.8
$K_{4,d}^{(4)} < 360$	d <sup>-1</sup>	97.1	99.7	121.0	95.1	143.8	79.8	102.5
$K_{5,d}^{(5)} < 360$	d <sup>-1</sup>	88.3	89.7	103.4	85.9	125.5	62.4	87.6
$Q_1 < 92230$	m <sup>3</sup> /d	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
$Q_2 < 36893$	m <sup>3</sup> /d	22922.0	24910.9	50892.0	23832.7	56891.0	22704.0	28157.0

One can argue whether to include all five measured disturbances in the extended nullspace method using "just-enough" measurements since then there would be no need to infer the effect of disturbances from the other process measurements, which is a good "feedforward" strategy that could improve control quality. We tested this option and found that the best set of variables (to be combined) chosen by the branch-and-bound algorithm that maximized the minimum singular value of  $\tilde{G}^T$  were  $y = [Q_1, K_{1,d}^{(1)}, K_{2,d}^{(2)}, K_{3,d}^{(3)}, K_{4,d}^{(4)}, Q_2, S_{\text{NH}_4}^{(s)}, \text{TSS}^{(s)}, \text{COD}^{(s)}, T^{(s)}]^T$ . Nonetheless, the nonlinear loss calculations (not detailed this time) showed this choice gives infeasible operation for disturbances  $d_2$ ,  $d_3$ , and  $d_4$ , and was therefore not selected.

## 5. DISCUSSION

This paper focused on the application of a sensitivity analysis procedure to the BSM1/ASMI wastewater treatment process. The work is based upon a steady-state analysis of a rigorous nonlinear model of the plant where the settler was modeled by the static one-dimension scalar mass conservation law with discontinuous fluxes since the more traditional Takacs's model fails to represent the complex behavior of secondary settlers. The resulting mathematical representation of the settler operation under steady-state conditions brings about a smoother function that may help convergence of the computational routine used to numerically optimize the model. The goal was to minimize operational costs subject to the most important requirement of delivering effluent within the regulation constraints given in Table 3. However, some aspects of the application of the aforementioned procedure to the WWTP need to be addressed.

The nominal optimization results showed that it is economically optimal to keep effluent suspended solids and ammonia concentrations at their respective upper bounds and that no internal recirculation of sludge should be used, at least under the steady-state assumption. Indeed, optimizations based on the nonlinear model of the process for the given set of disturbances confirm that these variables are always active (see Table 7). When operating the process dynamically, one may consider using  $Q_1$  to control some internal variable so as to improve the disturbance rejection capability of the process. If these variables are controlled at their respective optimal set points (active constraint control), a choice had to be made on the selection of the remaining five degrees of freedom, and we use the sensitivity analysis based on a plantwide procedure to decide on which five variables to fix control at their respective

nominal optimum values. The exact local (linear) method and the extended nullspace method based on the concept of self-optimizing control were used to systematically select those variables such that the cumbersome combinatorial curse of choosing and testing 5 out of 28 possible variable combinations, resulting in 98 280 possible control structures, is avoided. The combination matrices  $H$  were easily computed using elementary matrix algebra, as described by formulas 28, 29, and 30. The only burden with those calculations lies in the computation of the optimal matrices  $J_{\text{ss}}$ ,  $J_{\text{LR}}$ , and  $F$ . Since accuracy of second-order information found numerically is known to be difficult to guarantee, in addition to assuring positive definiteness of  $J_{\text{ss}}$ , calculation of  $F$  might become more attractive, and a replacement formula for eq 29 was derived as in eq 32.  $M_1$  in this equation can be freely selected, as long as it is a nonsingular matrix, and we chose  $M_1 = J_{\text{ss}}^{-1/2}$  so to avoid the need to compute  $J_{\text{ss}}$ . Moreover, since the solution for  $H$  in eq 28 is not unique,<sup>19</sup> we can also find a nonsingular  $n_s \times n_s$   $D$  matrix such that  $H_{\text{new}} = DH$  is another yet solution, and we can select  $D$  as a function of  $J_{\text{ss}}^{-1/2}$ ; in this paper, we assumed  $D = J_{\text{ss}}^{-1/2}$ .

## 6. CONCLUSION

This paper discussed the application of a sensitivity analysis procedure for selection of economic controlled variables for optimal operation of a wastewater treatment plant. For the given modified mathematical model of the process where a new model of the settler was developed based upon the static one-dimension scalar mass conservation law with discontinuous fluxes theory, keeping the active constraints ( $S_{\text{NH}_4}^{(s)}$ ,  $\text{TSS}^{(s)}$ , and  $Q_1$ ) at their optimal values and using linear combinations of the measurements as the five remaining unconstrained degrees of freedom can guarantee near-optimal operation with minimum economic loss when operating at the nominal optimal mode despite the severe disturbances that affect the process. Future work will focus on the design of a control system for the wastewater treatment process discussed in this contribution along with the dynamic performance assessment of proposed control configurations.

## ■ AUTHOR INFORMATION

### Corresponding Author

\*E-mail: antonio@dqu.ufcg.edu.br.

### Notes

The authors declare no competing financial interest.

## REFERENCES

- (1) Olsson, G.; Newell, B. *Wastewater Treatment Systems - Modelling, Diagnosis and Control*; IWA Publishing: London, U.K., 1999.
- (2) Olsson, G.; Nielsen, M. K.; Yuan, Z.; Lynggaard-Jensen, A.; Steyer, J. P. *Instrumentation, Control and Automation in Wastewater Systems*; IWA Publishing: London, U.K., 2005.
- (3) Olsson, G. ICA and me: a subjective review. *Water Res.* 2012, 46 (6), 1585-1624.
- (4) Stare, A.; Vrecko, D.; Hrab, S.; Sremčič, S. Comparison of control strategies for nitrogen removal in an activated sludge process in terms of operating costs: a simulation study. *Water Res.* 2007, 41, 2004-2014.
- (5) Ingildsen, P.; Olsson, G.; Yuan, Z. A hedging point strategy - balancing effluent quality, economy and robustness in the control of wastewater treatment plants. *Water Sci. Technol.* 2002, 45 (4-5), 317-324.
- (6) Samuelsson, P.; Halvarsson, B.; Carlsson, B. Cost-efficient operation of a denitrifying activated sludge process. *Water Res.* 2007, 41, 2325-2332.
- (7) Ayasa, E.; Goya, B.; Larrea, A.; Larrea, L.; Rivas, A. Selection of operational strategies in activated sludge processes based on optimization algorithms. *Water Sci. Technol.* 1998, 37 (2), 327-334.
- (8) Rivas, A.; Iribar, I.; Ayasa, E. Model-based optimization of wastewater treatment plants design. *Environ. Model. Software* 2008, 23, 435-450.
- (9) Chachuat, B.; Roche, N.; Larifi, M. A. Dynamic optimization of small size wastewater treatment plants including nitrification and denitrification processes. *Comput. Chem. Eng.* 2001, 25, 585-593.
- (10) Amand, L.; Carlsson, B. Optimal aeration control in a nitrifying activated sludge process. *Water Res.* 2012, 46 (7), 2101-2110.
- (11) Machado, V. C.; Gabriel, D.; Lafuente, J.; Barea, J. A. Cost and effluent quality controllers design based on the relative gain array for a nutrient removal WWTP. *Water Res.* 2009, 43 (20), 5129-5141.
- (12) Araujo, A. C. B.; Gallani, S.; Mulas, M.; Olsson, G. Systematic Approach to the Design of Operation and Control Policies in Activated Sludge Systems. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2011, 50 (14), 8542-8557.
- (13) Skogestad, S. Plantwide Control: The Search for the Self-Optimizing Control Structure. *J. Process Control* 2000, 10, 487-507.
- (14) Cadet, C.; Beteau, J. F.; Hernandez, S. C. Multicriteria control strategy for cost/quality compromise in wastewater treatment plants. *Control Eng. Pract.* 2004, 12, 335-347.
- (15) Alex, J.; Benedetti, L.; Copp, J.; Germay, K. V.; Jeppsson, U.; Nopens, I.; Pons, M. N.; Rieger, L.; Rosen, C.; Steyer, J. P.; Vanrolleghem, P.; Winkler, S. Benchmark Simulation Model no. 1 (BSM1). Technical Report, Dept. of Industrial Electrical Engineering and Automation - Lund University, Sweden, 2008.
- (16) Diehl, S. A Conservation Law with Point Source and Discontinuous Flux Function Modelling Continuous Sedimentation. *SIAM J. Appl. Math.* 1996, 56 (2), 388-419.
- (17) Diehl, S.; Jeppsson, U. A model of the settler coupled to the biological reactor. *Water Res.* 1998, 32 (2), 331-342.
- (18) Diehl, S. Operating charts for continuous sedimentation I - Control of steady states. *J. Eng. Math.* 2001, 41, 117-144.
- (19) Diehl, S. The solids flux theory - Confirmation and extension by using partial differential equations. *Water Res.* 2008, 42, 4976-4988.
- (20) Henze, M.; Grady, L. C. P.; Gujer, W.; Maris, G. V. R.; Matsuo, T. Activated sludge model no. 1 (asm1). Scientific and Technical Report no. 1, IAWQ, London, UK, 1987.
- (21) Takacs, I.; Páry, G. G.; Nohason, D. A dynamic model of the clarification-thickening process. *Water Res.* 1991, 25 (10), 1263-1271.
- (22) Vítacovic, Z. Z. Continuous settler operation: A dynamic model. In *Dynamic Modeling and Expert Systems in Wastewater Engineering*; Páry, G. G., Chapman, D., Eds.; Lewis: Chelsea, MI, U.S.A., 1989; pp 59-81.
- (23) Plozz, B. Gy.; Nopens, I.; DeClary, J.; Benedetti, L.; Vanrolleghem, P. A. Shall we upgrade one-dimensional secondary settler models used in WWTP simulators? - An assessment of model structure uncertainty and its propagation. *Water Sci. Technol.* 2011, 63 (8), 1726-1738.
- (24) Burger, R.; Diehl, S.; Nopens, I. A consistent modelling methodology for secondary settling tanks in wastewater treatment. *Water Res.* 2011, 45, 2247-2260.
- (25) Jeppsson, U.; Diehl, S. An Evaluation of a Dynamic Model of the Secondary Clarifier. *Water Sci. Technol.* 1996, 34 (5/6), 19-26.
- (26) Quenecq, D.; Duchain, D. Modelling and simulation of the steady state of secondary settlers in wastewater treatment plants. *Water Sci. Technol.* 2001, 43 (7), 39-46.
- (27) Verdickt, I. B.; Van Impe, J. F. Simulation analysis of a one-dimensional sedimentation model. In *Proceedings of the 15th triennial IFAC World Congress (CDROM)*; IFAC: Barcelona, Spain, 2002; p 6.
- (28) David, R.; Vasek, J. L.; Vande Weirer, A. Settler dynamic modeling and MATLAB simulation of the activated sludge process. *Chem. Eng. J.* 2009, 146, 174-183.
- (29) Chancelier, J. P.; Cohen de Lara, M.; Pacard, F. Analysis of a Conservation PDE with Discontinuous Flux - A Model of Settler. *SIAM J. Appl. Math.* 1994, 54 (4), 954-995.
- (30) Verma, A. ADMAT: Automatic differentiation in MATLAB using object oriented methods. In *SIAM Interdisciplinary Workshop on Object Oriented Methods for Interoperability*; Yorktown Heights, New York, USA; Society for Industrial and Applied Mathematics: Philadelphia, PA, 1998; pages 174-183.
- (31) Araujo, A. C. B.; Govatrnark, M.; Skogestad, S. Application of Plantwide Control to the HDA Process. I - Steady State Optimization and Self-Optimizing Control. *Control Eng. Pract.* 2007, 15, 1222-1237.
- (32) Araujo, A. C. B.; Hori, E. S.; Skogestad, S. Application of Plantwide Control to the HDA Process. II - Regulatory Control. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2007, 46, 5159-5174.
- (33) Araujo, A. C. B.; Skogestad, S. Control structure design for the ammonia synthesis process. *Comput. Chem. Eng.* 2006, 32 (12), 2920-2932.
- (34) Araujo, A. C. B.; Shang, H. Enhancing a Smelter Off-Gas System Using a Plantwide Control Design. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2009, 48 (6), 3004-3013.
- (35) Araujo, A. C. B.; Brito, R. P.; Shang, H. Mitigation of energy intensity of an industrial off-gas cleaning system using process engineering solutions. *J. Cleaner Prod.* 2009, 17, 1512-1525.
- (36) Baldea, M.; Araujo, A. C. B.; Skogestad, S.; Daouibi, P. Dynamic Considerations in the Synthesis of Self-Optimizing Control Structures. *AIChE J.* 2008, 54, 1830-1841.
- (37) Bangsiah, G. P.; Karwala, V. *Plantwide Control - Recent Developments and Applications*; Wiley: West Sussex, United Kingdom, 2012.
- (38) Skogestad, S. Control Structure Design for Complete Chemical Plants. *Comput. Chem. Eng.* 2004, 28, 219-234.
- (39) Akvad, V.; Skogestad, S.; Hori, E. S. Optimal measurement combinations as controlled variables. *J. Process Control* 2009, 19, 138-148.
- (40) Morari, M.; Stephanopoulos, G.; Arkan, Y. Studies in the Synthesis of Control Structures for Chemical Processes, part I: formulation of the problem, process decomposition and the classification of the control task, analysis of the optimizing control structures. *AIChE J.* 1980, 26 (2), 220-232.
- (41) Maarelveld, A.; Rijnsdorp, J. E. Constraint control on distillation columns. *Automatica* 1970, 6, 51-58.
- (42) Halvorsen, I. J.; Skogestad, S.; Morari, J. C.; Akvad, V. Optimal Selection of Controlled Variables. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2003, 42, 3273-3284.
- (43) Karwala, V.; Cao, Y. Bidirectional branch and bound for controlled variable selection. Part II: Exact local method for self-optimizing control. *Comput. Chem. Eng.* 2009, 33 (8), 1402-1412.
- (44) Khudenko, B. M.; Shpirt, E. Hydrodynamic parameters of diffused air systems. *Water Res.* 1986, 20 (7), 905-915.
- (45) Germay, K. V.; Rosen, C.; Jeppsson, U. WWTP dynamic disturbance modelling - an essential module for long-term benchmarking development. *Water Sci. Technol.* 2006, 53 (4-5), 255-254.



(46) Garmaey, K. V.; Jeppsson, U.; Battone, D. J.; Ingólfsson, P. Impact of reactive settler models on simulated WWTP performance. *Water Sci. Technol.* 2006, 53 (1), 159–167.

## Anexo III

Tabela 13: Matriz de Petersen para o modelo ASM1

$i \rightarrow$ $\downarrow j$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	Reaction
	$S_I$	$S_S$	$X_I$	$X_S$	$X_{BH}$	$X_{BA}$	$X_P$	$S_O$	$S_{NO}$	$S_{NH}$	$S_{ND}$	$X_{ND}$	$S_{ALK}$	
$\rho_1$		$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$		$-X_B$			$-\frac{X_B}{i_1}$	$\frac{b_H \frac{S_C}{K_S + S_S}}{K_{OH} + S_O} X_{BH}$
$\rho_2$		$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{1.56Y_H}$		$-X_B$			$\frac{1-Y_H}{11.256Y_H}$ $-\frac{X_B}{i_1}$	$\frac{b_H \frac{S_C}{K_S + S_S}}{K_{OH} + S_O}$ $\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \eta_D X_{BH}$
$\rho_3$						1		$-\frac{4.57-Y_A}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$	$-X_B - \frac{1}{Y_A}$			$-\frac{X_B}{i_1} - \frac{1}{Y_A}$	$\frac{b_A \frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}}}{K_{OA} + S_O} X_{BA}$
$\rho_4$				$1 - f_P$	$-1$		$f_P$					$X_B$ $-f_P X_P$		$b_H X_{BH}$
$\rho_5$				$1 - f_P$		$-1$	$f_P$					$X_B$ $-f_P X_P$		$b_A X_{BA}$
$\rho_6$										1	$-1$		$\frac{1}{i_1}$	$k_D S_{NO} X_{BH}$
$\rho_7$		1		$-1$										$\frac{k_A \frac{X_C / X_{BH}}{K_X + X_S / X_{BH}}}{\left[ \frac{S_O}{K_{OH} + S_O} + \eta_D \frac{K_{OH}}{K_{OH} + S_O} \right]}{K_{OH} + S_O} X_{BH}$
$\rho_8$											1	$-1$		$p_T (X_{ND} / X_S)$

Tabela 14: Valores dos parâmetros estequiométricos e cinéticos para os processos biológicos.

Parâmetros	UNIDADE	VALOR
<b>Estequiométricos</b>		
$Y_A$	g de célula de DQO formada. (g N oxidado) <sup>-1</sup>	0.24
$Y_H$	g de célula de DQO formada. (g N oxidado) <sup>-1</sup>	0.67
$f_P$	adimensional	0.08
$i_{XB}$	g N. (g DQO) <sup>-1</sup> em biomassa	0.08
$i_{XP}$	g N. (g DQO) <sup>-1</sup> em produtos particulados	0.06
<b>Parâmetros Cinéticos</b>		
$\mu_H$	d <sup>-1</sup>	4.0
$K_S$	g DQO.m <sup>-3</sup>	10.0
$K_{O,H}$	g (-DQO).m <sup>-3</sup>	0.2
$K_{NO}$	g NO <sub>3</sub> -N.m <sup>-3</sup>	0.5

$b_H$	$d^{-1}$	0.3
$n_g$	adimensional	0.8
$n_h$	adimensional	0.8
$K_h$	g DQO lentamente biodegradável. (g de célula de DQO.d <sup>-1</sup> )	3.0
$K_X$	g DQO lentamente biodegradável. (g de célula de DQO) <sup>-1</sup>	0.1
$\mu_A$	$d^{-1}$	0.5
$K_{NH}$	g NH <sub>3</sub> -N.m <sup>-3</sup>	1.0
$b_A$	$d^{-1}$	0.05
$K_{O,A}$	g (-DQO).m <sup>-3</sup>	0.4
$k_a$	m <sup>3</sup> . (g DQO.d) <sup>-1</sup>	0.05

---

Tabela 15: Tabela de parâmetros de sedimentação

	Parâmetros	Unidade	Valor
Máxima velocidade de sedimentação	$v'_0$	m.d <sup>-1</sup>	250.0
Velocidade máxima de sedimentação de Vesilind	$v_0$	m.d <sup>-1</sup>	474
Parâmetro de sedimentação zonal	$r_h$	m <sup>3</sup> .(g SS) <sup>-1</sup>	0.000576
Parâmetro de sedimentação flocculante	$r_p$	m <sup>3</sup> .(g SS) <sup>-1</sup>	0.00286
Frações não sedimentáveis	$f_{ns}$	adimensional	0.00228